

2413
Nr

Laboratorium voor Chemische Technologie

Verslag behorende
bij het fabrieksvoorontwerp
van

J.J.Legerstee en E.B. de Vries

onderwerp:

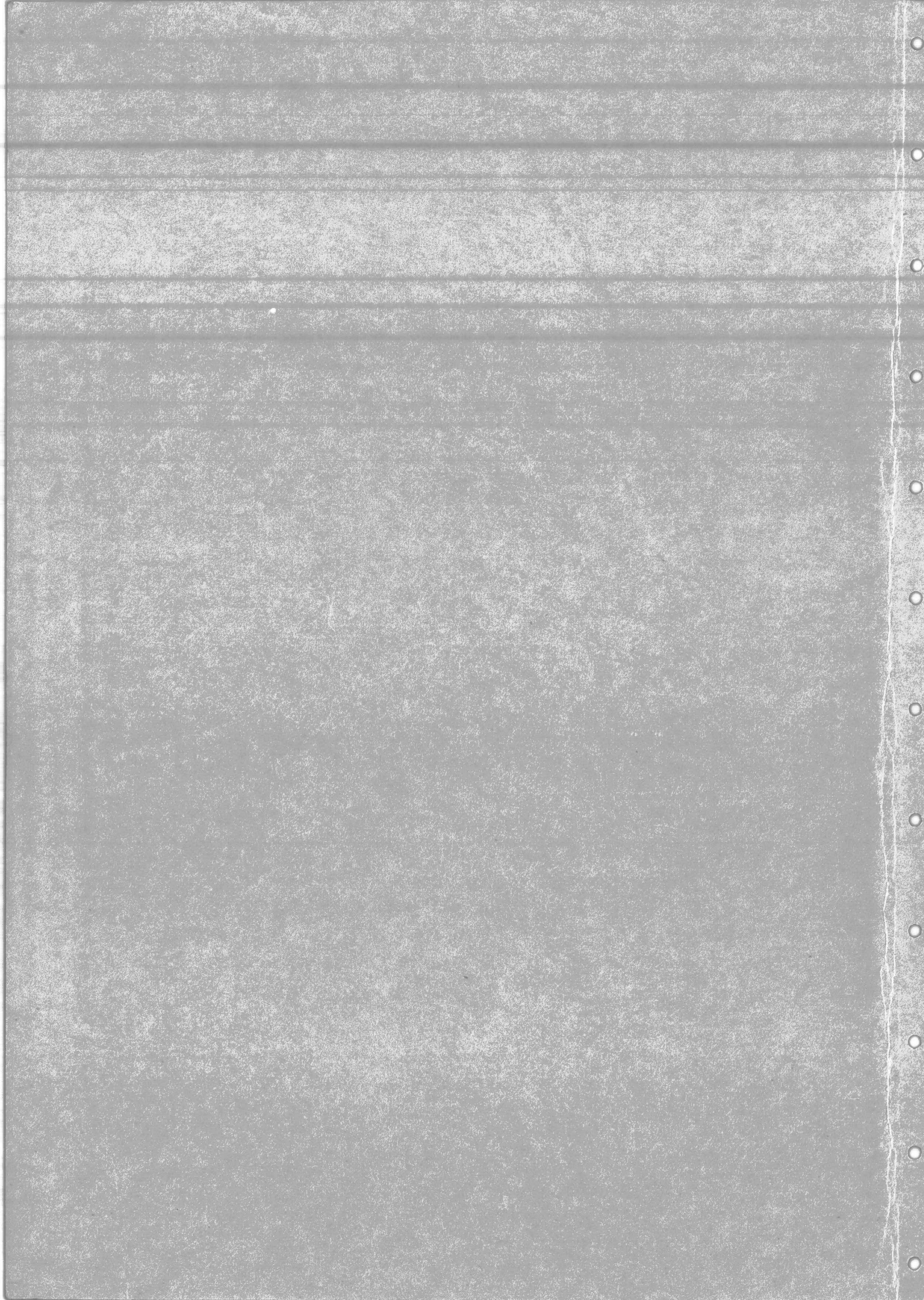
Synthese van acetaldoel uit acetaldehyde

adres: Tjaskerlaan 93 R'dam 3012

Boeroestraat 33 Delft

opdrachtdatum: mei '75

verslagdatum: april '76



SYNTHESE VAN ACEETALDOL

uit aceetaldehyde

april '76

J.J.Legerstee
Tjaskerlaan 93
R'dam 3012

E.B.de Vries
Boeroestraat 33
Delft

<u>Inhoudsopgave</u>	<u>blz</u>
§1 Samenvatting	1
§2 Inleiding	2
§3 Uitgangspunten voor het voorontwerp	4
§4 Beschrijving van het proces	6
§5 Proceskondities en gegevens:	
Reaktiewarmte	7
Katalysator	7
Kinetiek van de condensatie	8
Temperatuur en druk	14
§6 Motivering keuze apparatuur en berekening hiervan:	
Motivering	17
Berekening platen warmtewisselaar	20
Berekening verdamper	30
§7 Massa- en warmtebalans	36
§8 Symbolenlijst	38
§9 Literatuuroverzicht 1 en 2	40
<u>Bijlagen</u>	
Bijlage 1 :Platen warmtewisselaar gegevens	42
Bijlage 2 :Materiaalkeuze voor de reaktor	45
Bijlage 3 :Schatting oppervlakken v.d.warmtewisselaar	46
Bijlage 4 :Schatting drukval in de warmtewisselaar	53
Bijlage 5 :Flow sheet	54
Bijlage 6 :Massa- en warmtebalans schematisch	55

§1) Samenvatting

Dit fabrieksvoorontwerp beschrijft de synthese van aldol uit aceetaldehyde. Men dient hierbij te bedenken dat in werkelijkheid geen aldol, maar een verbinding tussen aldol en aceetaldehyde, genaamd aldoxan, wordt gevormd.

Het aceetaldehyde wordt daartoe gemengd met natronloog, dat als katalysator fungeert en ingevoerd in de reaktor. De reaktor is een platen warmtewisselaar. Door het vergroten van de afstand tussen 2 platen is extra reaktieruimte gecreëerd. De omzettingsgraad naar aldoxan is 75,6 %. Het mengsel wordt vervolgens geneutraliseerd en water wordt toegevoegd om de viscositeit laag te houden. Met een stijgende filmverdamer wordt het onomgezette aceetaldehyde verwijderd. De temperaturen in de reaktor-platen warmtewisselaar zijn tussen 10 en 20°C. De hoogste temperatuur in de verdamer is 80°C. De drukken zijn atmosferisch. Er is wel een hogere druk nodig om de friktie in de warmtewisselaar te overwinnen (10,6 atm maximaal).

De capaciteit van de fabriek is 45.000 ton aldoxan (overeenkomend met 30.000 ton aldol) per jaar.

De selectiviteit is geschat op 0,97.

Een belangrijk aspect van de fabriek is een goede temperatuurcontrole van de reaktor.

Conclusies en aanbevelingen

In de toekomst is het aan te bevelen te kijken naar een vaste katalysator. Het probleem hierbij zal zijn de grote hoeveelheid warmte die moet worden afgevoerd.

De problemen bij dit ontwerp zijn de onbekendheid van veel fysische konstanten. Tevens is het inzicht in het verloop van de reactie en de daarbij gevormde produkten nog niet volledig.

§2) Inleiding

Aldol (3-hydroxy-butanal) is een instabiele verbinding. Bij kamertemperatuur gaat deze stof snel over in paralal. Bij iets verhoogde temperatuur ontstaat crotonaldehyde in zuur milieu en ontstaan in basisch milieu allerlei hogere polymeren en condensaten. Aldol is dan ook meestal tussenprodukt. Vooral de bereidingen van crotonaldehyde en butaandiol¹⁻³ uit deze stof zijn belangrijk. Deze producten zijn n.l. om te zetten in butadieën, wat een belangrijk uitgangspunkt is voor de vervaardiging van synthetische rubbers. Crotonaldehyde wordt verder nog in geringere mate omgezet naar o.a. crotonzuur en het conserveringsmiddel sorbinezuur. Hiermee is slechts een klein gedeelte van de mogelijke omzettingen van aldol aangegeven. Het belangrijkste uitgangspunt bij de synthese is echter het butadieën.

Na de 2^{de} wereldoorlog tot heden wordt butadieën echter op andere manieren in voldoende mate geproduceerd. In Europa voornamelijk door afscheiding uit de gassen die vrij komen bij het thermisch kraken van b.v. nafta (voor de etheenbereiding); in de Verenigde Staten door dehydrogenatie van butenen. Het is dan ook niet verwonderlijk dat de activiteit op het gebied van de aldolproductie na de 2^{de} wereldoorlog sterk afnam. Ter illustratie:

jaar	produktie (in ton) in West-Duitsland (lit 1)
1939	68920
1941	184000
1943	266000
1946	41000
1947	29500
1949	8000

Voor de ontwikkelingslanden geldt echter een andere situatie. De

olieprijzen zijn er relatief hoog terwijl dit voor ethanol, door de intensieve landbouw, niet geldt. Uit ethanol kan aceetaldehyde, de uitgangsstof bij de synthese van aldol, gevormd worden.

Dit fabrieks-voorontwerp moet dan ook worden gezien in het kader van het project van de T.H. Delft voor Columbia. Een project dat tot doel heeft het realiseren van relatief kleine produktie-eenheden in Columbia, voor stoffen die aantrekkelijk zijn, en economisch gezien voordelig.

§3) Uitgangspunten voor het voorontwerp

Er wordt uitgegaan van een produktie van 30.000 ton aldol per jaar. Daar er, zoals bij de bespreking van de kinetiek uiteengezet zal worden, geen aldol maar een "verbinding" tussen aldol en aceetaldehyde (aldoxan) gevormd wordt, komt dit neer op 45.000 ton aldoxan per jaar.

De uitgangsstof, aceetaldehyde, wordt verondersteld een zekere hoeveelheid zuur te bevatten. (voornamelijk azijnzuur).

De reactie dient gekatalyseerd te worden. In aanmerking komen (basische) ionwisselaars of basische oplossingen.

De samenstelling van het eindprodukt is als volgt:

75 gew.%	Aldol	<i>aldoxan?</i>	tabel 1
20 gew.%	Water	(met natriumacetaat)	
2,5 gew.%	Aceetaldehyde		
2,5 gew.%	Hogere condensatie produkten		

De keuze van de hoeveelheid water is gebaseerd op praktische gronden (viscositeit). De aanwezigheid van water is niet nadelig bij de volgende synthese stap.

Relevante fysische gegevens

Aceetaldehyde

$$M = 44$$

$$\Delta H_{\text{verd.}} = 25,71 \text{ KJ/mol} \quad (\text{lit 2})$$

$$\Delta H_{\text{verbr.}} = - 278,77 \text{ Kcal/mol} \text{ (CO}_2\text{g, AcH}_1\text{, H}_2\text{O}_1\text{, 25}^\circ\text{C)} \quad (\text{lit 3})$$

$$C_p = 54,64 \text{ J/mol } ^\circ\text{K} \text{ (lit 2)} ; C_p = 55,24 \text{ J/mol } ^\circ\text{K} \text{ (lit 4)}$$

$$\text{Kookpunt} : 20,8 \text{ (760 mm)} \text{ (lit 2)} ; 19,8^\circ\text{C} \quad (\text{lit 4})$$

$$\text{Dichtheid} : 0,7834 \text{ kg/l (20}^\circ\text{C)} \quad (\text{lit 3})$$

$$\Delta H_{\text{vorm.}} : - 166,4 \text{ KJ/mol (AcH}_g\text{)} \quad (\text{lit 2})$$

Viscositeit : 0°C. 0,2797 cp
 10°C 0,2557 cp
 20°C 0,22 cp (lit 3)

$\lambda = 0,17 \text{ W/m } ^\circ\text{C}$ (lit 5)

Aldol

M = 88

$\Delta H_{\text{verbr.}} = - 546,858 \text{ (CO}_2\text{, H}_2\text{O}_1\text{, aldol}_1\text{)}$ (lit 6)

dichtheid : 1,103 kg/l (lit 3)

Aldoxan

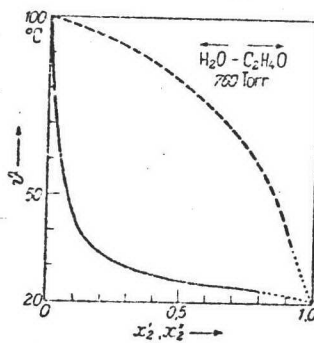
M = 132

dichtheid : 1,067 kg/l (lit 7)

Acetaldehyde-water (lit 2)

T-x-figuur:

x_1 H₂O, Wasser
 M: 18,02 Kp: 100 °C
 x_2 C₂H₄O, Acetaldehyd
 M: 44,05 Kp: 20,2 °C



[P7]

x_2'	x_2''	θ °C
$p = 760 - 765 \text{ Torr}$		
0,0009	0,106	97,0
0,004	0,276	93,0
0,003	0,463	86,5
0,015	0,582	77,5
—	0,585	75,0
—	0,634	67,5
—	0,749	63,0
0,044	—	62,0
—	0,832	53,5
0,067	—	52,5
—	0,882	41,0
0,133	—	40,5
—	0,924	36,0
0,182	—	33,0
0,289	—	28,5

fig. 1

De 10 gew.% loogoplossing is corrosief, de andere vloeistoffen en mengsels daarvan nagenoeg niet.

Explosiegrenzen: vol.% in lucht

acetaldehyde 4,0 - 10,4 (lit 8)

aldol 2,2 - 12 (lit 8)

§4) Beschrijving van het proces

In een vat (V_2) wordt de aceetaldehyde voeding (1) gemengd met de recirculatiestroom (9) die opgebouwd is uit aceetaldehyde en water. Met behulp van pomp P_3 wordt het mengsel op druk gebracht waarna een dusdanige hoeveelheid natronloog (5) wordt toegevoegd dat de pH gelijk is aan 11. Dit mengsel wordt verdeeld over 3 indentieke platen warmtewisselaars die tevens reaktor zijn. In verband met de maximale werkdruk is ieder van deze warmtewisselaars verdeeld in 3 in serie staande delen (R_4, R_6 en R_8 stellen samen een van de 3 parallele warmtewisselaars voor). De pompen P_3, P_5 en P_7 leveren de druk voor stroming door de warmtewisselaar-eenheden.

In ieder van de in serie staande delen is de omzettingsgraad gelijk d.w.z. $1/3$ van de uiteindelijke omzettingsgraad ($\xi = 0,756$).

De 3 uitstromende mengsels worden samengevoegd (14). In V_9 wordt het mengsel vervolgens geneutraliseerd met azijnzuur (2); hier wordt tevens water toegevoegd (3).

Met behulp van pomp P_{10} wordt het mengsel dan weer op de benodigde druk gebracht. In warmtewisselaar H_{11} wordt het mengsel daarna opgewarmd van 20°C tot 47°C . Dit gebeurt met het opgewarmde koelwater uit warmtewisselaar H_{15} .

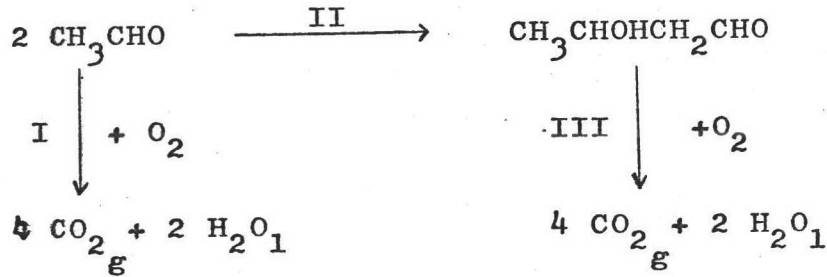
In de verdamper wordt vervolgens de grootste hoeveelheid aceetaldehyde door verdamping verwijderd. De damp (18), die naast aceetaldehyde ook een hoeveelheid water bevat, wordt gekondenseerd in H_{12} en gerecirculeerd (9).

Met pomp P_{14} wordt de produktstroom (19) op druk gebracht (20) en door warmtewisselaar H_{15} gevoerd, waarbij de temperatuur daalt tot 20°C (21).

§5) Procescondities en gegevens

Reaktiewarmte

De molaire vormingsenthalpie van aldol is niet bekend. Met behulp van de verbrandingswarmte die voor acetaldehyde en aldol bekend is, kunnen we toch de reaktiewarmte berekenen:



$$\begin{aligned}
 \Delta H_{\text{I}} &= \Delta H_{\text{II}} + \Delta H_{\text{III}} \\
 - 2 \times 278,77 &= \Delta H_{\text{II}} - 546,86 \\
 \Delta H &= - 10,68 \text{ kcal/mol aldol}
 \end{aligned}$$

In de praktijk worden echter andere waarden gevonden:

$$\begin{aligned}
 \Delta H &= - 26,5 \text{ kcal/mol aldol} \quad (\text{lit 8}) \text{ of daarmee overeenkomend} \\
 \Delta H &= - 300 \text{ kcal/kg produkt} \quad (\text{lit 1}).
 \end{aligned}$$

Een verklaring voor deze afwijkende waarden wordt gegeven bij de kinetiek bespreking (blz. 9). Op grond daarvan wordt een reaktiewarmte genomen van 300 kcal/kg produkt.

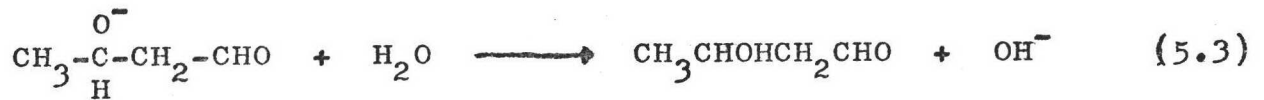
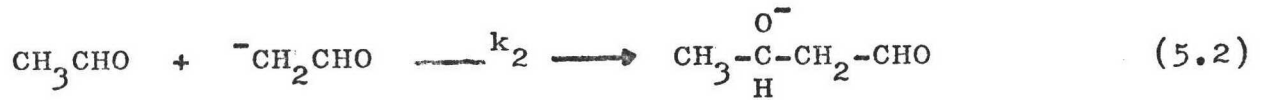
Katalysator

Als katalysator wordt een 10 gew.% NaOH oplossing gebruikt. Deze oplossing wordt toegevoegd aan het acetaldehyde-recirculatie mengsel en geeft een homogeen mengsel. Er wordt een dusdanige hoeveelheid van deze loogoplossing toegevoegd dat de pH van de stroom naar de reaktor gelijk is aan 11.

Overigens verschijnen er na 1970 Japanse artikelen met vaste katalysatoren (b.v. metaaloxiden) voor de acetaldehyde condensatie. Dit gebeurt nog op research schaal. Bovendien is de literatuur erg ontoegankelijk.

De kinetiek van de condensatie van acetaldehyde tot aldol

1) Mechanisme



De 3^{de} reactie is zeer snel, de eerste 2 reacties zijn snelheidsbepalend.

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = k_2(\text{AcH})(\text{Ac}^-) \quad (5.4)$$

$$\frac{d(\text{Ac}^-)}{d(t)} = k_1(\text{AcH})(\text{OH}^-) - k_{-1}(\text{Ac}^-)(\text{H}_2\text{O}) - k_2(\text{Ac}^-)(\text{AcH}) \quad (5.5)$$

Volgens het "steady state" principe geldt $\frac{d(\text{Ac}^-)}{d(t)} = 0$. Uit vgl 5.5 volgt dan:

$$(\text{Ac}^-) = \frac{k_1(\text{AcH})(\text{OH}^-)}{k_{-1}(\text{H}_2\text{O}) + k_2(\text{AcH})} \quad (5.6)$$

Vgl 5.6 ingevuld in vgl 5.4 geeft nu:

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = \frac{k_1 \cdot k_2 (\text{AcH})^2 (\text{OH}^-)}{k_{-1}(\text{H}_2\text{O}) + k_2(\text{AcH})} \quad (5.7)$$

Indien men bij hoge acetaldehyde concentraties werkt, mag vgl 5.7 vereenvoudigd worden tot:

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = k_1(\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.8)$$

Nu geven Späth (lit9), Hanschke (lit10) e.a. aan dat bij de technische productie van aldol, in plaats van aldol vermoedelijk aldoxan

(2,6-dimethyl-4-hydroxy-1,3-dioxan) gevormd wordt:

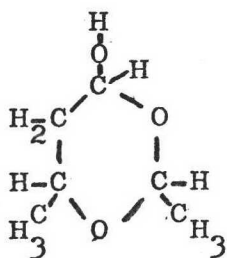


fig. 2 : Aldoxan

Uit het onderzoek van zowel het infrarode als het ultraviolette spectrum blijkt dat het technische aldol geen carbonyl groep bevat (lit11). P.T.Mctigue en L.C.Gruen (lit12) hebben bovendien het moleculaire gewicht van technische aldol bepaald; dat bleek ongeveer 130 te zijn hetgeen goed overeenkomt met het moleculaire gewicht van aldoxan(132). Tevens geven zij aan dat het n.m.r.spectrum van technische aldol consistent is met het aldoxan molekuul.

Een laatste aanwijzing kan verder de reaktiewarmte bij de condensatie zijn. Het berekende warmte effect van de reactie naar aldol ($\Delta H = -10,7$ kcal/mol aldol) komt niet overeen met hetgeen in de praktijk gevonden wordt ($\Delta H = -26,5$ kcal/mol aldol).

Op grond van bovenstaande argumenten komen de belangrijkste onderzoekers op dit gebied tot de conclusie dat aldoxan het belangrijkste produkt van de aceetaldehyde condensatie is.

Dit betekent voor de kinetiek dat:

$$-\frac{d(\text{AcH})}{d(t)} = 3 \frac{d(\text{aldol})}{d(t)} \quad (5.9)$$

(Men mag hier voor aldol natuurlijk ook aldoxan schrijven, daar er voor ieder molekuul aldol een molekuul aldoxan gevormd moet worden)

De maximale opbrengst aan (gebonden) aldol is dus $66\frac{2}{3}\%$.

We nemen aan dat de reactie van aldol naar aldoxan zeer snel is en

dat de kinetiek van de aldolkondensatie bepaald blijft door vgl 5.8.

2) Reaktiesnelheidskonstante

2.1 A.A.Frost en R.G.Pearson (lit13) geven met als bron het artikel van R.P.Bell uit 1937 (lit14) de volgende snelheidsvergelijking:

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = (2,6 \cdot 10^{-4} + 0,111(\text{OH}^-))(\text{AcH}) \quad (5.10)$$

voor $T = 25^\circ\text{C}$. Voor $(\text{OH}^-) 0,003 \text{ M}$ valt de term $2,6 \cdot 10^{-4}$ weg. Deze konstante term is een poging om de katalyse door water in rekening te brengen. Bij acetaldehyde concentraties tussen 0,1 en 0,5 M is de reactieorde tussen 1 en 2, bij hogere concentraties 1. Er wordt nog tevens gesteld dat de dehydratatie van acetaldehyde-hydraat te snel is om snelheidsbepalend te zijn.

2.2 R.P.Bell en P.T.Mctigue (lit11), die van mening zijn dat het gevormde aldol in hoofdzaak uit aldoxan bestaat, vinden dat de reaktiesnelheidskonstante k_1 uit vgl 5.8 bij 25°C gelijk is aan $9 \cdot 10^{-2} \text{ l} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

2.3 J.B.Anderson en M.S.Peters (lit 15) houden rekening met hydraatvorming. De totale acetaldehyde concentratie wordt gegeven door:

$$(e\text{AcH}) = (\text{AcH}) + (\text{hydraat}) \quad (5.11)$$

Het hydraat evenwicht wordt gegeven door:

$$\frac{(\text{hydraat})}{(\text{AcH})(\text{H}_2\text{O})} = K \quad (5.12)$$

Deze K waarde is bij 0°C gelijk aan 0,0485 l/mol en bij 25°C 0,0218 l/mol. Voor 0°C krijgt men nu:

$$(\text{AcH}) = \frac{(e\text{AcH})}{1 + 0,0485(\text{H}_2\text{O})} \quad (5.13)$$

Nu wordt gesteld dat voor $(e\text{AcH}) 10 \text{ M}$, men vgl 5.13 kan schrijven

als:

$$(\text{AcH}) = K'(\text{eAcH}) \quad (5.14)$$

waarbij K' 20% varieert bij 0°C en minder dan 20% bij 25°C . Vgl 5.14 ingevuld in vgl 5.7 geeft:

Handwritten note:
 k₅ met
 eAcH is immers =
 AcH by Bell.

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = \frac{k_1 \cdot k_2 (K')^2 (\text{eAcH})^2 (\text{OH}^-)}{k_{-1} (\text{H}_2\text{O}) + k_2 K' (\text{eAcH})} \quad (5.15)$$

$$\text{of} \quad \frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = \frac{k_5 (\text{eAcH})^2 (\text{OH}^-)}{k_6 (\text{H}_2\text{O}) + (\text{eAcH})} \quad (5.16)$$

waarbij $k_5 = k_1 K'$ en $k_6 = k_{-1} / k_2 K'$

Voor k_5 en k_6 wordt gevonden:

0°C	$k_5 = 10 \text{ 1/mol min}$	$k_6 = 0,184$
25°C	$k_5 = 8,2 \text{ 1/mol min}$	$k_6 = 0,0063$

Daar we geïnteresseerd zijn in de reaktiesnelheidsconstante bij hoge acetaldehyde concentraties moeten we k_5 terugrekenen naar k_1 . Hiervoor moet K' berekend worden.

Bij $(\text{eAcH}) = 0 \text{ M}$ $(\text{H}_2\text{O}) = 55,56 \text{ M}$, bij $(\text{eAcH}) = 10 \text{ M}$ $(\text{H}_2\text{O}) = 31 \text{ M}$.

Nu kunnen we voor één temperatuur K' berekenen voor $(\text{eAcH}) = 0$ en 10 M . Het gemiddelde van deze 2 K' waarden wordt gebruikt om k_1 uit te rekenen.

0°C	0M	$K' = 0,271$	}	$\Rightarrow K' = 0,335$
	10M	$K' = 0,399$		

$$k_1 = k_5 / K' = 10 / 0,335 \cdot 60 = 0,50 \text{ 1/mol s} \quad (5.19)$$

25°C	0M	$K' = 0,453$	}	$\Rightarrow K' = 0,524$
	10M	$K' = 0,595$		

$$k_1 = k_5 / K' = 8,2 / 0,524 \cdot 60 = 0,26 \text{ 1/mol s} \quad (5.20)$$

Kijken we naar de temperatuur afhankelijkheid van k_1 dan zien we dat de reaktiesnelheidsconstante bij stijgende temperatuur afneemt; dit zou dus een negatieve aktiveringsenergie inhouden ($E_A = -17,6 \text{ kJ/mol}$)

2.4 Volgens P.T.McTigue en L.C.Gruen (lit12) bestaat dus het reactie produkt hoofdzakelijk uit het trimeer. Als reactiesnelheidsvergelijking geven zij voor 25°C:

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = \frac{0,15(\text{AcH})^2(\text{OH}^-)}{1,3 + (\text{AcH})} \quad \text{vgl 5.16.} \quad (5.21)$$

e AcH ≡ AcH

De 1,3 in de noemer is opgebouwd uit een konstante $k \cdot (\text{H}_2\text{O})$.

Daar we bij lage (H_2O) en hoge (AcH) werken geldt: $(\text{AcH}) \gg k \cdot (\text{H}_2\text{O})$, dus vgl 5.21 wordt:

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = 0,15 \cdot (\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.22)$$

Als nevenreactie geven zij de Cannizzaro reactie van acetaldehyde naar azijnzuur en ethanol, met reactievergelijking:

$$\frac{d(\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H})}{d(t)} = k_{\text{can}} \cdot (\text{AcH})^2(\text{OH}^-) \quad (5.23)$$

met $k_{\text{can}} = (4 \pm 1) \cdot 10^{-3} \text{ l}^2/\text{mol}^2 \text{ s}$. In een aldolfabriek heeft men een gemiddelde acetaldehyde concentratie van ongeveer 10 M. Dit ingevuld in vgl 5.23 geeft:

$$- \frac{d(\text{AcH})}{d(t)} = \frac{d(\text{CH}_3\text{CO}_2\text{H})}{d(t)} \cdot 2 = 0,08 \cdot (\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.24)$$

Wordt vgl 5.24 vergeleken met vgl 5.22, dan zou men verwachten dat via de Cannizzaro reactie een redelijke hoeveelheid azijnzuur en ethanol geproduceerd wordt. Maar uit de produktspecificatie van zuiver aldol in tabel 2 blijkt dat het optreden van de Cannizzaro reactie verwaarloosd kan worden (lit16)

Tabel 2: Produktsamenstelling zuiver aldol

Aldol	72,82 %
Acetaldehyde	4,65 %
Crotonaldehyde	1,59 %
Hogere condensatie produkten	2,60 %
Water	18,34 %

3) Volg-en nevenreacties

Uit tabel 2 volgt dat de vorming van azijnzuur te verwaarlozen is. Tevens blijkt hier uit dat de dehydratatie naar crotonaldehyde de belangrijkste volgreactie is.

Dit is een zuur gekatalyseerde reactie. Daar we in een basisch milieu werken en tevens hebben aangenomen dat het produkt hoofdzakelijk uit aldoxan bestaat, zal maar weinig crotonaldehyde gevormd worden.

De volg-en nevenreacties kunnen beperkt worden door de temperatuur goed te controleren. D.C.Hull (lit 17) raadt temperaturen aan van 5-15°C in de reaktor. In de scheidingssectie zijn korte verblijftijden wenselijk (lit 16, blz 104).

4) Overzicht en conclusies

Bij de reaktiesnelheidsvergelijking

$$\frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = k_1 \cdot (\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.8)$$

zijn de volgende waarden voor de reaktiesnelheidskonstante k_1 gevonden:

Tabel 3 : De verschillende waarden voor de reaktiesnelheidskonst.

	<u>k_1 in 1/mol s</u>	<u>T in °C</u>
Frost Pearson (Bell)	0,111	25
Bell-McTigue	0,09	25
Anderson-Peters	0,50	0
	0,26	25
McTigue-Gruen	0,15	25

mit vgl. boer

We kunnen deze k-waarden in 2 groepen verdelen, te weten die van de groep Bell-McTigue en die van Anderson-Peters. Daar de groep Bell-

McTigue met verschillende meetmethodes tot praktisch dezelfde k-waarden komt lijken deze waarden betrouwbaarder dan die van Anderson-Peters. We nemen dan ook de k-waarde uit het jongste artikel van de Bell-McTigue groep. Tevens nemen we aan dat het hoofdprodukt van de condensatie van aceetaldehyde aldoxan is. De uiteindelijke reaktiesnelheidsvergelijking wordt:

$$- \frac{d(\text{AcH})}{d(t)} = 3 \cdot \frac{d(\text{aldol})}{d(t)} = 0,45 \cdot (\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.25)$$

Is de reactor 25°? July 23

Temperatuur en druk

De temperatuur in de platen warmtewisselaar (reaktor) wordt tussen 10 en 20°C gehouden. Dit is een gemiddelde van de in de literatuur voorgestelde reaktietemperaturen. Gezien het kookpunt van aceetaldehyde en aldoxan volgt hieruit dat de druk atmosferisch mag zijn. De enige overdruk aanwezig in de reaktor is dan ook die welke nodig is om de weerstand tegen stroming te overwinnen.

Verdamper

We nemen aan dat er in de top van de verdamper evenwicht heerst tussen de vloeistof- en dampfase en dat het systeem ternair is: aceetaldehyde, water en aldoxan. Het aantal vrijheidsgraden is dan bepaald volgens de fase-regel van Gibbs:

$$F = C + 2 - P$$

$$F = 3 + 2 - 2 = 3$$

De samenstelling van de vloeistofstroom die de verdamper verlaat hebben we vastgelegd (zie tabel 1 blz 4). Dit betekent dat we nog een variabele mogen aannemen. We kiezen hiervoor de druk, waardoor de temperatuur ook vastligt.

We hebben echter geen evenwichtsgegevens van dit ternaire systeem.

Nu is het kookpunt van aldoxan beduidend hoger als dat van aceetaldehyde en water ($>200^{\circ}\text{C}$, vergelijk dioxan lit 3)

We nemen daarom aan dat de dampfase geen aldol bevat. Dit is een redelijke aanname te meer daar het systeem niet ideaal is. We zien dit al uit de T-x-figuur (blz 5) van het binaire systeem aceetaldehyde-water. Wel zal de grote hoeveelheid aldol ($x_{\text{aldoxan}} = 0,335$) een kookpuntsverhoging van het systeem aceetaldehyde-water veroorzaken.

We stellen deze (arbitrair) op 10°C .

We kunnen nu bij de verdere bepaling van temperatuur en druk er van uitgaan dat we het binaire systeem aceetaldehyde-water hebben en maken daarom gebruik van figuur 1.

De druk die we kiezen moet zodanig zijn dat we met koelwater (20°C) het verdampte aceetaldehyde en water kunnen kondenseren.

Bij 1 atm. is de dampfase ($x_{\text{AcH}} = 0,8$; $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$) behorende bij de aangenomen vloeistofsamenstelling ($x_{\text{AcH}} = 0,05$; $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,95$) bekend. Bij deze samenstelling hoort een "bubble point" van 23°C . Dit is $2,2^{\circ}\text{C}$ boven het kookpunt van aceetaldehyde maar nog te laag.

We moeten dus het T-x-figuur bij hogere druk kennen. We nemen daarom aan dat de vloeistof-damp-krommen bij iets verhoogde druk hetzelfde verloop hebben, zodat we slechts de temperatureas moeten verschuiven, om de figuur bij hogere druk te kennen.

We kiezen nu die druk waarbij het kookpunt van aceetaldehyde 30°C is.

Met clausius-Clapeyron :

$$\ln \left(\frac{p_2}{p_1} \right) = - \frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right)$$

$$\ln \left(\frac{p_2}{1} \right) = - \frac{25,71 \cdot 10^3}{8,3143} \left(\frac{1}{273,15+30} - \frac{1}{273,15+20,8} \right)$$

$$p_2 \approx 1,4 \text{ atm.}$$

Het "bubble point" van het te kondenseren mengsel is dan $23 + 9,2 = 32,2^{\circ}\text{C}$.

We kunnen dan tevens aflezen dat bij de druk van $1,4 \text{ atm}$. en de door ons vastgelegde produktstroom, $x_{\text{AcH}} = 0,05$ en $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,95$, een temperatuur van 70°C hoort.

Gekorrigeerd voor de aanwezigheid van aldol moet dus de temperatuur aan de top van de verdamper 80°C zijn.

Bij deze temperatuur ontstaan er weinig hogere polymeren als de contacttijd maar kort is.

§6) Motivering keuze apparatuur en berekening hiervan

Reaktor

In de reaktor is een goede temperatuursbeheersing noodzakelijk in verband met polymerisatie.

Bij het proces van Hüls bestond de reaktor uit een aantal shell-tube warmtewisselaars met additioneel reaktievolume in pijpen erbuiten, terwijl 96 % van het reaktiemengsel direct werd gerecirculeerd. Door deze recirculatie wordt de vrijkomende reaktiewarmte over een grotere massa verdeeld, waardoor de temperatuur beter beheersd kan worden. Deze reaktor is op te vatten als een tank.

Zonder recirculatie is de reaktor te beschouwen als een buis en heeft men een kleiner reaktievolume nodig. Dit is echter met een shell-tube warmtewisselaar moeilijk te realiseren. Men zou in het optimale geval 9 buizen krijgen per pass met een lengte van 16 m. Er zouden 56 passes noodzakelijk zijn en extra reaktievolume zou buiten de warmtewisselaar moeten worden gecreëerd. (Het aangenomen temperatuursverschil is 10°C). Bovendien zou men hier niet mee kunnen volstaan omdat 2 extra buizen noodzakelijk zijn voor het geval één of meer buizen dicht gaat zitten met hogere polymerisatie produkten. Reiniging van zo'n shell-tube warmtewisselaar is eveneens een lastig karwei.

*Over de
mogelijkheid
af te brengen?*

Daarom is als reaktor een platen warmtewisselaar gekozen. Het koeloppervlak dat benodigd is, is gering door de hoge warmteoverdrachtscoëfficiënten terwijl extra reaktievolume eenvoudig is in te bouwen. Tevens is de platenwarmtewisselaar ruimte besparend en gemakkelijk schoon te maken.

Verdamper

Het is wenselijk de produktstroom zo kort mogelijk aan hogere temperaturen bloot te stellen. Daarom is gekozen voor een verdamper met

een stijgende film. De contacttijd ligt tussen 1 en 5 s.

Toevoegen van het loog

Als men direkt natronloog aan het aceetaldehyde zou toevoegen, kunnen "hot spots" (door plaatselijk hoge hydroxide concentraties) ontstaan. Door reactie zou de warmte kunnen worden geleverd, waarvoor door aceetaldehyde dan bij atmosferische druk kan verdampen. Om dit te voorkomen worden het aceetaldehyde en de natronloog apart verpompt en pas bij hogere druk gemengd.

Het neutraliseren van het mengsel

Hiervoor zijn een paar mogelijkheden:

- 1) Toevoegen van azijnzuur
- 2) Toevoegen van fosforzuur en het precipitaat afscheiden met behulp van een centrifuge en een filter.
- 3) Gebruik maken van een ionenwisselaar

ad 1 Deze oplossing is het gemakkelijkst als er geen eisen gesteld worden aan de produktstroom wat betreft het bevatten van zouten. Wordt geëist dat de zouten er uit moeten, dan heeft men de keuze tussen mogelijkheid 2 en 3.

ad 2 Het precipitaat zal hoofdzakelijk bestaan uit NaH_2PO_4 en Na_2HPO_4 . Stoechiometrische verhoudingen zijn voldoende.

ad 3 In het algemeen geldt dat de benodigde apparatuur goedkoper is dan bij 2, maar daar men meer dan stoechiometrische hoeveelheden nodig heeft, kunnen de chemicaliën kosten hoger zijn. Daar we hier met azijnzuur kunnen regenereren valt dit argument weg.

In ons geval wordt de toe te voegen hoeveelheid NaOH-oplossing mede bepaald door de hoeveelheid zuur (azijnzuur) in de aceetaldehyde voeding. We kunnen denken aan een ionenwisselaar voor de voeding om het azijnzuur te verwijderen en vervolgens NaOH-

oplossing toe te voegen.

Na de reaktor kan het mengsel dan geneutraliseerd worden met een "weak acid ionexchanger" die te regenereren is met azijnzuur. Om het proces continu te houden kan worden gedacht aan een "moving bed". Het zal echter een belangrijk probleem zijn, het verlies aan produkt door regeneratie te beperken.

Er is gekozen voor de eerste oplossing.

Bij de neutralisatie van het reaktiemengsel met azijnzuur moet de menging goed zijn, omdat in zuur milieu gemakkelijk crotonaldehyde gevormd wordt. Hierom is voor een kleine geroerde tank gekozen. Er is voor een atmosferische druk gekozen, zodat het water en het azijnzuur (waterige oplossing) gemakkelijk toegevoegd kunnen worden.

Nu volgt achtereenvolgens de berekening van de reaktor-platen warmtewisselaar en de verdamper.

Een schatting van het benodigde oppervlak in de warmtewisselaars en de drukval over de warmtewisselaars is gegeven in de bijlage 3 en 4 (blz 46 t/m 53)

Berekening platen warmtewisselaar-reaktor

De berekeningen zullen worden uitgevoerd aan de hand van het "Thermal handbook" van Alfa Laval. (lit18)

De totale stroom wordt verdeeld over 3 indentieke platen warmtewisselaars. Alvorens zo'n warmtewisselaar te berekenen, worden eerst de benodigde fysische gegevens van de in- en uitgaande stroom berekend, omgerekend of geschat:

Ingaande stroom

$$2,373 : 3 = 0,791 \text{ kg AcH/s}$$

$0,148 : 3 = 0,049 \text{ kg verdunde loogopl./s}$. We stellen deze loogoplossing qua eigenschappen en fysische konstanten gelijk aan zuiver water.

$$(\text{OH}^-) = 10^{-3} \text{ mol/l} \quad (\text{zie massabalans})$$

$$\phi_{v,in} = 0,791/0,7834 + 0,049/1 = 1,0587 \text{ l/s} = 3,81 \text{ m}^3/\text{hr}$$

$$\bar{\rho} = (0,791 + 0,049)/1,0587 = 0,7934 \text{ kg/l}$$

$$(\rho c)_{\text{AcH}} = 783,4 \cdot 0,2983 = 233,69 \text{ kcal/m}^3 \text{ }^\circ\text{C} \quad (c = c_p)$$

$$(\rho c)_{\text{H}_2\text{O}} = 1000 \cdot 1 = 1000 \text{ kcal/m}^3 \text{ }^\circ\text{C}$$

$$\begin{aligned} \bar{\rho} c &= (233,69 \cdot 0,791/0,7834 + 0,049 \cdot 1000/1) / (0,791/0,7834 + 0,049) \\ &= 262 \text{ kcal/m}^3 \text{ }^\circ\text{C} \end{aligned}$$

$$\bar{\lambda} = 0,17 \text{ W/m }^\circ\text{C}$$

$$\eta_{\text{AcH}, 15^\circ\text{C}} = 0,237$$

$$\eta_{\text{mengsel}} = 0,25$$

Uitgaande stroom

$$1,795 : 3 = 0,598 \text{ kg aldoxan/s}$$

$$0,579 : 3 = 0,193 \text{ kg AcH/s}$$

$$0,148 : 3 = 0,049 \text{ kg "H}_2\text{O"/s}$$

De hogere produkten zijn hierbij als aldoxan gerekend.

Hieruit volgt de omzettinggraad van acetaldehyde naar aldoxan en hogere produkten : $\xi = 0,756$

$$\varepsilon = \frac{V_{\xi=1} - V_{\xi=0}}{V_{\xi=0}}$$

$$\varepsilon = \frac{(0,791/1,067 + 0,049) - (0,791/0,7834 + 0,049)}{(0,791/0,7834 + 0,049)} = - 0,253$$

$$\phi_{v,uit} = \phi_{v,in} (1 + \xi \varepsilon) = 3,81 (1 - 0,253 \cdot 0,756) = 3,08 \text{ m}^3/\text{hr}$$

$$\bar{p} = (0,598 + 0,193 + 0,049)/0,8555 = 0,982 \text{ kg/l}$$

De c_p van aldoxan moet geschat worden:

$$c_{p,dioxan 1,4} = 152,9 \text{ J/mol } ^\circ\text{C} \quad (\text{lit 3})$$

Uit Perry, blz 3-219 (lit 19) volgt dan:

$$c_{p,aldoxan} = 152,9 + 4,2(-3,3,6 + 2,9,9 + 11,0) = \underline{\underline{236,9 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}}}$$

$$\rho^c_{aldoxan} = 1067 \cdot 0,4283 = 456,99 \text{ kcal/m}^3 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\bar{\rho}^c = \frac{(233,69 \cdot 0,193/0,7834 + 456,99 \cdot 0,598/1,067 + 1000 \cdot 0,049/1)}{(0,193/0,7834 + 0,598/1,067 + 0,049)}$$

$$\bar{\rho}^c = \underline{\underline{423,8 \text{ kcal/m}^3 \text{ } ^\circ\text{C}}}$$

$$\bar{\lambda} = 0,17 \text{ W/m } ^\circ\text{C}$$

$$(\text{OH}^-) = 10^{-3} \text{ mol/l}$$

$$\eta_{\text{mengsel}} = 2 \text{ cp (schatting)}$$

Totale warmtestroom

We berekenen de warmtewisselaar zo, dat het reaktiemengsel, dat de warmtewisselaar met een temperatuur van 20°C instroomt, deze ook weer verlaat met een temperatuur van 20°C . De totale hoeveelheid warmte die moet worden afgevoerd is dus gelijk aan het pompvermogen en de reaktiewarmte.

Het toegevoerde pompvermogen wordt gelijk gesteld aan $2,5 \text{ KJ/s}$.

Voor de reaktiewarmte geldt:

$$\phi_w = 300 \cdot 4,2 \cdot 0,598 = 753,5 \text{ KJ/s}$$

zodat de totale warmtestroom wordt:

$$\phi_{w, \text{t\ddot{o}t}} = 753,5 + 2,5 = \underline{\underline{756 \text{ KJ/s}}}$$

Bij de berekening van de warmtewisselaar kunnen we niet uitgaan van de optimalisatie methode, zoals gegeven in het "handbook", om het juiste type warmtewisselaar te kiezen. Dit komt omdat niet zomaar een processtroom moet worden gekoeld, maar een relatief kleine stroom waarin door reactie voortdurend warmte wordt geproduceerd. We kiezen daarom voor een rangschikking van de kanalen (ruimten tussen 2 platen) waarbij eerst de processtroom van 20°C tot 10°C wordt gekoeld bij normale (optimale) plaatafstand. Daarna wordt de processtroom door een kanaal gevoerd, waarbij de platen zo ver van elkaar zijn geplaatst, dat het reaktievolume daartussen zodanig is, dat de hoeveelheid warmte die daar ontwikkeld wordt, de processtroom weer opwarmt tot 20°C. Daarna volgt weer een kanaal met platen op de normale korte afstand om te koelen tot 10°C enz.

We kunnen dus alleen op grond van de "flow" per kanaal een keuze van het type plaat warmtewisselaar maken. Uit tabel T101 (blz 42) blijkt dat de P₄₅ het meest geschikte type is.

Bij de berekeningen nemen we aan dat de warmte die in de "koelsekties" door reactie ontstaat, te verwaarlozen is gezien de geringe verblijftijd. Tevens nemen we aan dat de warmteafvoer in de "opwarmsekties" te verwaarlozen is: door de grote afstand tussen de platen, heeft de processtroom daar een lagere snelheid en dus is er daar sprake van een slechtere warmteoverdracht.

Overigens zijn deze 2 verwaarlozingen tegengesteld wat de aanname ervan alleen maar gunstiger maakt.

Feitelijk zouden we nu iedere afkoeling- en opwarmsektie moeten door-

rekenen. We beperken ons echter tot de eerste en laatste sectie van beiden.

1^{ste} kanaal koelen (20°C → 10°C)

$$0,791 \text{ kg/s AcH} = 17,98 \text{ mol AcH/s}$$

$$c_p = 55 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}$$

$$0,049 \text{ Kg/s H}_2\text{O} = 2,722 \text{ mol H}_2\text{O/s}$$

$$c_p = 75,6 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}$$

$$\phi_w = 10 \cdot 55 \cdot 17,98 + 10 \cdot 75,6 \cdot 2,722 = 11,947 \text{ KJ/s}$$

1^{ste} kanaal opwarmen (10°C → 20°C)

De reaktiewarmte in deze sectie is dus gelijk aan 11,947 KJ/s:

$$\Delta \xi \cdot 0,791 \cdot 300 \cdot 4,2 = 11,947$$

$$\Delta \xi = 0,012$$

Welk volume is hier voor nodig?

We gaan er vanuit dat er sprake is van propstroom tussen de platen zodat we te maken hebben met een ideale buis:

$$V = \phi_{v,in} \cdot C_{\text{AcH},0} \cdot \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{d_{\text{AcH}}}{R_{\text{AcH}}} \quad (6.1)$$

$$R_{\text{AcH}}^- = 0,45 \cdot (\text{AcH})(\text{OH}^-) \quad (5.25)$$

$$(\text{AcH}) = C_{\text{AcH},0} \cdot (1 - \xi) / (1 + \varepsilon \xi) \quad (6.2)$$

(OH⁻) wordt als konstant aangenomen (niet volume afhankelijk).

Invullen van (5.25) en (6.2) in (6.1) geeft:

$$V = \frac{\phi_{v,in}}{0,45 \cdot (\text{OH}^-)} \cdot \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{(1 + \varepsilon \xi)}{(1 - \xi)} d\xi \quad (6.3)$$

$$V = \frac{\phi_{v,in}}{0,45(\text{OH}^-)} \cdot \left[-(1 + \varepsilon) \ln \left\{ \frac{1 - \xi_2}{1 - \xi_1} \right\} - \varepsilon (\xi_2 - \xi_1) \right] \quad (6.4)$$

Vullen we nu in: $\xi_2 = 0,012$; $\xi_1 = 0$; $\varepsilon = -0,253$; $\phi_{v,in} = 1,0587$

(100) } follows the

en $(OH^-) = 10^{-3}$ dan vinden we voor dat volume:

$$V = 27,85 \text{ l}$$

Het plaatoppervlakte bij de P_{45} bedraagt $0,55 \text{ m}^2$ (zie tabel T101).

Hieruit volgt dan de plaatafstand bij dit eerste opwarmkanaal:

$$d \cdot 0,55 = 27,85 \cdot 10^{-3}$$

$$d = 5,06 \cdot 10^{-2} \text{ m} = \underline{\underline{5,06 \text{ cm}}}$$

laatste kanaal koelen ($20^\circ\text{C} \rightarrow 10^\circ\text{C}$)

$$0,598 \text{ kg aldoxan/s} = 4,53 \text{ mol aldoxan/s} \quad c_p = 236,9 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}$$

$$0,193 \text{ kg AcH/s} = 4,387 \text{ mol AcH/s} \quad c_p = 55 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}$$

$$0,049 \text{ kg H}_2\text{O/s} = 2,722 \text{ mol H}_2\text{O/s} \quad c_p = 75,6 \text{ J/mol } ^\circ\text{C}$$

$$\phi_w = 10(4,53 \cdot 236,9 + 4,387 \cdot 55 + 2,722 \cdot 75,6) = 15,204 \text{ KJ/s}$$

laatste kanaal opwarmen

$$\Delta \xi \cdot 0,791 \cdot 300 \cdot 4,2 = 15,204$$

$$\Delta \xi = 0,0153$$

$$\xi_2 = 0,598/0,791 = 0,756 \quad \text{en} \quad \xi_1 = 0,756 - 0,0153 = 0,7407$$

Vullen we deze gegevens weer in in vgl(6.4) dan volgt daaruit voor het volume:

$$V = 112,24 \text{ l} \quad \text{en voor de plaatafstand: } \underline{\underline{d = 20,4 \text{ cm}}}$$

We zien dus dat de hoeveelheid warmte die wordt afgevoerd oploopt van 11,947 voor het eerste kanaal tot 15,204 voor het laatste kanaal. De gemiddelde afvoer per kanaal is $(11,947 + 15,204)/2 = 13,575 \text{ KJ/s}$. Bij een totale warmtestroom van 756 KJ/s betekent dit $756/13,575 = \underline{\underline{56}}$ opwarmkanalen en $\underline{\underline{56}}$ afkoelingskanalen.

Bepaling van de totale warmteoverdrachtscoëfficiënt (U)

Bij deze bepaling kunnen we niet gebruik maken van de korrelatiefor-

Bladspinaal

1/2 sec 2 1/2 sec

mules die zijn opgesteld voor vlak aangestroomde platen, omdat de platen van de warmtewisselaar sterk geribbeld zijn. Dit bewerkstelligt een groter oppervlakte en een hogere turbulentie.

Het "thermal handbook" geeft echter U-waarden voor ieder type plaat warmtewisselaar voor verschillende, met water te koelen, stoffen bij optimale snelheden. (zie tabel T102, blz 44).

Zo vinden we voor organische stoffen ($\rho \cdot c = 480, \lambda = 0,17, \eta = 1$) naar water van 40°C in de P_{45} met $\phi_{v,org.} = 4 \text{ m}^3/\text{hr}$ een $U = 2200 \text{ kcal/m}^2\text{hr } ^{\circ}\text{C}$

Ons reaktiemengsel heeft echter niet dezelfde fysische konstanten. Hiervoor moet een correctie worden aangebracht. Een andere correctie, namelijk die, die moet worden aangebracht omdat de temperatuur van het koelwater lager is dan 40°C , is klein en wordt derhalve verwaarloosd. Wel moet nog worden gecorrigeerd voor de iets lagere snelheden waarmee we werken in de P_{45} . (3,8 tot 3,08 t.o.v. 4).

Gecorrigeerde U eerste kanaal

Daar waar de fysische konstanten van de te koelen vloeistof weinig afwijken van de fysische konstanten van de "standaard vloeistof" mag worden gesteld dat:

$$U = \sqrt[4]{\frac{\rho c \lambda^2}{\eta}} \quad (6.5) \text{ en dus:}$$

$$\frac{U}{U_{st.v.}} = \sqrt[4]{\frac{\rho c \lambda^2 \eta_{st.v.}}{\rho_{st.v.} c_{st.v.} \lambda_{st.v.}^2 \eta_{st.v.}}}$$

$$\frac{U}{2200} = \sqrt[4]{\frac{269 \cdot 1 \cdot (0,17)^2}{480 \cdot 0,25 \cdot (0,17)^2}}$$

waaruit volgt:

$$U = 2692 \text{ kcal/m}^2, \text{hr, } ^{\circ}\text{C}$$

De correctie voor de lagere snelheid is lastiger. Er is alleen be-

kend dat de partiële warmteoverdrachtscoëfficiënt h evenredig is met de snelheid tot de macht 0,8. Deze h 's moeten geschat worden. De warmteweerstand van de (dunne) wand wordt verwaarloosd. Voor de "fouling factor" wordt genomen $0,1 \text{ m}^2 \text{ }^\circ\text{C}/\text{Kw} = 1,17 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2 \cdot \text{ }^\circ\text{C} \cdot \text{hr}/\text{kcal}$.

De U van water naar water bij de optimale snelheid, die we ook voor het koelwater zullen aannemen, is $3450 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}$ (tabel T 102)

$$\frac{1}{U} = 1,17 \cdot 10^{-4} + \frac{1}{h_{\text{H}_2\text{O}}} + \frac{1}{h_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (6.6)$$

Wordt nu voor U 3450 ingevuld dan vinden we:

$$h_{\text{H}_2\text{O}} = 11570 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}$$

Nu kunnen we de h van het reaktiemengsel bij "flow" is $4 \text{ m}^3/\text{hr}$ bepalen:

$$\frac{1}{2692} = 1,17 \cdot 10^{-4} + \frac{1}{11570} + \frac{1}{h_4}$$

$$h_4 = 5951 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}$$

$$h_{3,8} = 5951 \cdot (3,8/4,0)^{0,8} = 5724 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}$$

$$\frac{1}{U} = 1,17 \cdot 10^{-4} + (11570)^{-1} + (5724)^{-1} \quad \text{waaruit } U \text{ volgt:}$$

$$\underline{U = 2644 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}}$$

Gekorrigeerde U laatste kanaal

Analoog aan het bovenstaande krijgen we:

$$\frac{U}{2200} = \sqrt[4]{\frac{423,8 \cdot 1 \cdot (0,17)^{2,7}}{480 \cdot 2 \cdot (0,17)^2}}$$

$$U = 1793 \text{ kcal}/\text{m}^2 \text{hr } ^\circ\text{C}$$

waarna de korrektie voor de lagere snelheid volgt:

$$\frac{1}{1793} = 1,17 \cdot 10^{-4} + (11570)^{-1} + (h_4)^{-1} \quad h_4 = 2822 \text{ kcal/m}^2 \text{ hr}^\circ\text{C}$$

$$h_{3,08} = 2822 \cdot (3,08/4,0)^{0,8} = 2289,5 \text{ kcal/m}^2 \text{ hr}^\circ\text{C}$$

$$(U)^{-1} = 1,17 \cdot 10^{-4} + (11570)^{-1} + (2289,5)^{-1}$$

$$\underline{U = 1562 \text{ kcal/m}^2 \text{ hr}^\circ\text{C}}$$

Nu ligt het log.temperatuursverschil vast:

eerste kanaal

$$\rho \cdot c \cdot \phi_{v,in} \cdot \Delta T = U \cdot 2 \cdot \text{Opp} \cdot \Delta T_m$$

$$269 \cdot 3,81 \cdot 10 = 2644 \cdot 2 \cdot 0,55 \cdot \Delta T_m$$

$$\underline{\Delta T_m = 3,52^\circ\text{C}}$$

laatste kanaal

$$423,8 \cdot 3,08 \cdot 10 = 1562 \cdot 2 \cdot 0,55 \cdot \Delta T_m$$

$$\underline{\Delta T_m = 7,60^\circ\text{C}}$$

Het log.temperatuursverschil moet dus van 7,60 voor de laatste gang in 56 stappen aflopen tot 3,52 °C. Nemen we de globale opwarming van het koelwater 7,60 - 3,52 ≈ 4,1 °C dan kunnen we de benodigde hoeveelheid koelwater berekenen:

$$756 = 4,1 \cdot 4,2 \cdot x$$

$$\text{KJ/s} \quad ^\circ\text{C} \cdot \text{KJ/kg}^\circ\text{C} \cdot \text{kg/s}$$

$$x = 43,9 \text{ kg H}_2\text{O/s} = \underline{\underline{158 \text{ m}^3/\text{hr koelwater}}}$$

We houden ons aan de optimale "flow" per kanaal: 3,8 m³/hr (T102)

Hieruit volgt het aantal parallelle kanalen:

158/3,8 = 41,5 . Er zijn in totaal 2.56 = 112 kanalen, dus de beste rangschikking wordt:

3 series van 37 kanalen. (met $\phi_v = 158/37 = 4,27 \text{ m}^3/\text{hr}$)

Dit houdt in dat de temperatuur van het reaktiemengsel niet steeds het mooie verloop heeft wat we hebben aangenomen omdat het log.tem-

peratuursverschil niet regelmatig kleiner wordt, maar in 3 stappen afloopt. Door het kleine log. temperatuursverschil kan de temperatuur echter nooit veel gaan verschillen met de door ons aangenomen grenzen van 10°C en 20°C. De maximumtemperatuur zal nog geen 22°C, en de minimumtemperatuur nog geen 8°C, bedragen.

Een schatting van de ingangstemperatuur van het koelwater kan worden gemaakt aan de hand van het log. temperatuursverschil in de laatste koelsectie:

$$\Delta T_m = \frac{(20-10) - (T_{H_2O, uit} - T_{H_2O, in}) \cdot 0,435}{\log(20 - T_{H_2O, uit}) / (10 - T_{H_2O, in})}$$

$$\text{met } T_{H_2O, uit} - T_{H_2O, in} \approx 1,37^\circ\text{C} \quad \text{en } \Delta T_m = 7,6^\circ\text{C}$$

$$\text{Hieruit volgt: } \underline{T_{H_2O, in} \approx 5,9^\circ\text{C}}$$

Uiteraard zal men de juiste temperatuur in de praktijk moeten vinden.

Drukval in de warmtewisselaar

De drukval per kanaal voor een bepaalde volumestroom water door 'n warmtewisselaar kan afgelezen worden uit een nomogram. We vinden:

$$\underline{\text{eerste kanaal: } \phi_{v, in} = 3,8 \text{ m}^3/\text{hr} \longrightarrow J = 0,357 \text{ atm/H.T.U}}$$

$$\underline{\text{laatste kanaal: } \phi_{v, uit} = 3,08 \text{ m}^3/\text{hr} \longrightarrow J = 0,224 \text{ atm/H.T.U.}}$$

Het aantal H.T.U.'s (Θ) wordt gegeven door:

$$\Theta = \Delta T / \Delta T_m \quad (6.7)$$

Dit geldt voor water van 40°C. In een breed gebied mag echter de volgende korrektie worden toegepast voor andere stoffen:

$$f = (\rho_{40} \cdot c_{40} / \rho c)^{0,72} \cdot (\lambda / \lambda_{40})^{0,57} \cdot (\eta_{40} / \eta)^{0,28} \quad (6.8)$$

$$\varphi_j = (\eta / \eta_{40})^{0,15} \cdot \rho / (\rho_{40} \cdot f) \quad (6.9)$$

$$J = (\Delta P / \theta) = \varphi_j \cdot J_{w,40} \quad (6.10)$$

eerste kanaal

$$f = 1,701 \quad ; \quad \varphi_j = 0,409 \quad ; \quad \theta = 10/3,52 = 2,84$$

$$\Delta P = 0,409 \cdot 0,357 \cdot 2,84 = 0,415 \text{ atm.}$$

laatste kanaal

$$f = 0,685 \quad ; \quad \varphi_j = 1,717 \quad ; \quad \theta = 10/7,6 = 1,316$$

$$\Delta P = 1,717 \cdot 0,224 \cdot 1,316 = 0,506 \text{ atm}$$

De gemiddelde drukval per kanaal is dus:

$$(0,415 + 0,506)/2 = 0,46 \text{ atm}$$

Voor 56 kanalen is de totale drukval:

$$\Delta P = 56 \cdot 0,46 = \underline{\underline{25,8 \text{ atm.}}}$$

Daar de maximale werkdruk 12 atg is moeten 3 pompen gebruikt worden. (De warmtewisselaar kan opgesplitst gedacht worden in 3 delen).

De drie delen hebben een verschillende lengte. Deze lengten kunnen globaal geschat worden. We nemen daarvoor aan dat de plaatafstand in de reaktieruimten (opwarmsekties) lineair toeneemt van 5,06 cm tot 20,4 cm. Verder nemen we aan dat ieder deel uit 19 koel- en opwarmsekties bestaat.

1^{ste} deel: lengte opwarmsekties: $19(5,06 + 10,17)/2 = 144,7 \text{ cm}$

De plaatdikte is 0,6 mm en de plaatafstand van de koelsekties en de koelwaterstroomkanalen is 4,9 mm. (zie T101, blz 42).

De totale lengte wordt dus:

$$144,7 + 2 \cdot 19 \cdot 0,49 + 1 \cdot 19 \cdot 0,49 + 4 \cdot 19 \cdot 0,06 = 177 \text{ cm} = \underline{\underline{1,77 \text{ m}}}$$

2^{de} deel: Analoog aan het bovenstaande wordt gevonden $\underline{\underline{2,75 \text{ m}}}$

3^{de} deel: Analoog aan het bovenstaande wordt gevonden $\underline{\underline{3,72 \text{ m}}}$

Het geheel kan uitgevoerd worden in konstruktie staal (zie bijlage 2 blz 45).

Berekening verdamper

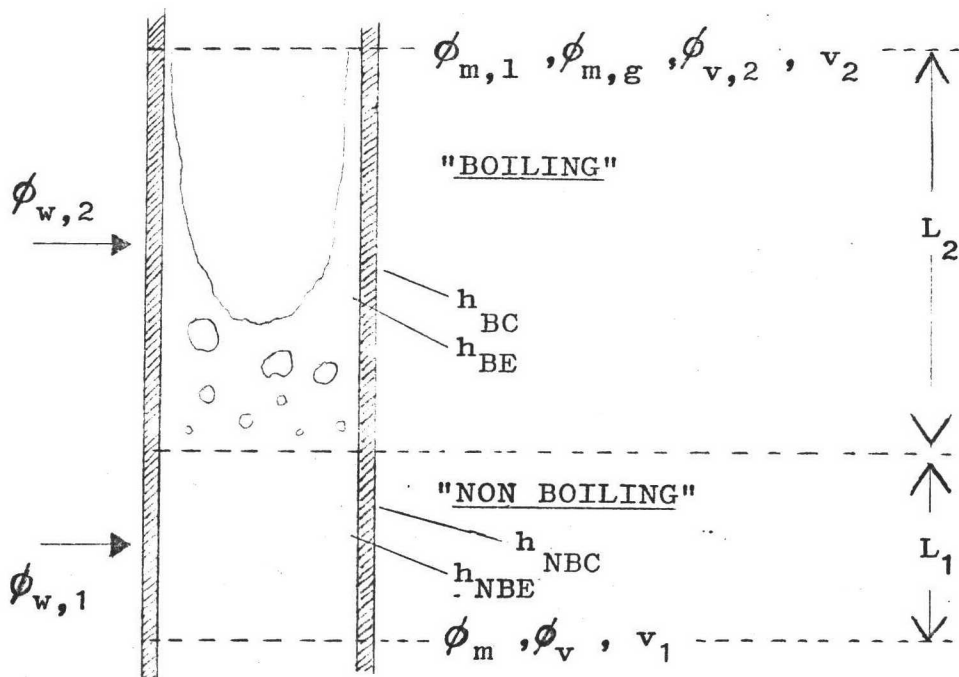
Er is gekozen voor een verdamper met een stijgende film. Er is dan sprake van een korte contacttijd, zodat zo min mogelijk polymerisatie zal optreden.

De belangrijkste condities zijn al gegeven in het hoofdstuk "Procescondities en gegevens". (blz 7 e.v.)

Uit de T-x-figuur van aceetaldehyde en water (blz 5) volgt dat de eerste damp gevormd wordt bij 49°C. De correctie voor de druk (1,4 atm; 9,2 °C) en voor de aanwezigheid van aldoxan (10°C) zijn aangebracht.

Dit is de reden waarom de voeding eerst wordt opgewarmd tot 47°C alvorens de verdamper in te gaan.

In de verdamper wordt de stroom dan verder opgewarmd tot 49°C in de z.g.n. "non boiling" sectie (NB). Het verdampen vindt vervolgens plaats in de "boiling" sectie (B), (zie figuur 3)



figuur 3

De kondenskant en de "evaporation" kant worden aangegeven met de letters C en E.

Het aantal pijpen ($D_o = 0,025$ m en $D_i = 0,020$ m) wordt bepaald door de uittreesnelheid. We kiezen eerst voor een "annular" flow in verband met de gemakkelijke scheiding van damp en vloeistof. Uit Perry (blz 5-39) blijkt dat de superficiële gassnelheid dan moet liggen tussen 30 en 70 ft/s, en dat de superficiële vloeistof-snelheid kleiner moet zijn dan 2 ft/s. We kiezen een gassnelheid 20 % onder de maximale gassnelheid, dit is 56 ft/s of wel 17 m/s. Uit de ideale gaswet volgt, dat bij een temperatuur van 80°C een gas een molair volume heeft van $20,8 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$ *by 1.40 atm*. Het gemiddelde moleculaire gewicht van de damp is:

$$\bar{M} = 0,573 \cdot \left(\frac{0,520}{44} + \frac{0,053}{18} \right)^{-1} = 38,8 \text{ g/mol} \quad ?$$

Nu is de dichtheid van de damp te berekenen: $\rho_g = 1,865 \text{ kg/m}^3$

Het aantal pijpen is te berekenen volgens:

$$n = \frac{\phi_{m,g}}{\rho_g} \cdot \frac{1}{v_g \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2} = 57,5$$

We nemen 58 pijpen.

De volumestroom aan het begin en eind (top) van de verdamper zijn als volgt te berekenen:

$$\phi_{v,1} = \phi_m / \rho_1 = 2,89 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$\phi_{v,2} = \phi_{m,l} / \rho_1 + \phi_{m,g} / \rho_g = 0,310 \text{ m}^3/\text{s}$$

Hieruit volgt dat de in- en uittreesnelheden gelijk zijn aan:

$$v_1 = 0,159 \text{ m/s} \quad \text{en} \quad v_2 = 17,0 \text{ m/s}$$

De logaritmische gemiddelde snelheid, nodig om de warmteoverdrachtscoëfficiënt te berekenen is gelijk aan 3,60 m/s. (Perry 11-31).

De benodigde hoeveelheid warmte voor het opwarmen van 47°C tot 49°C , $\phi_{w,1}$, en voor het opwarmen van 49°C tot 80°C en het verdampen

$\phi_{w,2}$, wordt berekend met behulp van tabel 4 en 5 .

$$\phi_{w,1} = \sum_i (c_{p,i} \cdot \phi_{m,i} \cdot \Delta T_1) = 12,2 \text{ KJ/s}$$

$$\phi_{w,2} = \sum_i (c_{p,i} \cdot \phi_{m,i} \cdot \Delta T_2 + \phi_{m,g,i} \Delta H_{1 \rightarrow v,i}) = 613 \text{ KJ/s}$$

Tabel 4 :

	$c_{p,i} \text{ (KJ/kg}^\circ\text{C)}$	$\phi_{m,i} \text{ (kg/s)}$	$c_{p,i} \phi_{m,i}$
Aldoxan + hogere produkten	1,795	1,794	3,220
Water en natriumacetaat	4,186	0,514	2,152
Aceetaldehyde	1,250	0,579	0,724

$$\sum_i c_{p,i} \phi_{m,i} = 6,096 \text{ KJ/s}^\circ\text{C}$$

Tabel 5 :

	$\Delta H_{1 \rightarrow v,i} \text{ (KJ/kg)}$	$\phi_{m,g,i} \text{ (kg/s)}$	$\Delta H_{1 \rightarrow v,i} \phi_{m,g,i}$
Aceetaldehyde	584	0,520	304
Water	2260*	0,053	120

$$\sum_i \Delta H_{1 \rightarrow v,i} \cdot \phi_{m,g,i} = 424 \text{ (KJ/s)}$$

* Bij een temperatuur van 80°C uit Perry (blz 3-114)

De warmteoverdrachtscoëfficiënten zijn met de volgende formules te berekenen:

- De buiswand:

$$h_T = \frac{2 \lambda}{D_o \cdot \ln(D_o/D_i)} = 2,15 \cdot 10^4 \text{ J/sm}^2\text{ }^\circ\text{C}$$

waarbij $\lambda = 60 \text{ J/sm}^\circ\text{C}$

- Vuillaag stoomzijde : $h = 10^4 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$

- Vuillaag in de verdampingssektie wordt verwaarloosd vanwege de hoge snelheid.

- Vuillaag in de opwarmsektie: $h = 2 \cdot 10^4 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$

- Kondensfilm met de formule uit Perry (blz 10-15):

$$h_{BC} = 0,943 \cdot \frac{\lambda}{L} \cdot \left(\frac{L^3 \rho^2 g \cdot \Delta H_{1+v}}{\lambda \cdot \eta \cdot T_f} \right)^{0,25}$$

- Het vloeistof-damp mengsel in de buizen met de formule uit Perry (blz 10-30)

$$h_{BE} = 0,0225 \cdot \frac{\lambda}{D_i} \cdot (Re)^{0,8} \cdot \left(\frac{c_p \eta}{\lambda} \right)^{0,4}$$

- De vloeistof in de opwarmsektie met de formule uit F.T.V. (blz 83):

$$h_{NBE} = 0,027 \cdot \frac{\lambda}{D_i} \cdot (Re)^{0,8} \cdot \left(\frac{c_p \eta}{\lambda} \right)^{0,33}$$

- De kondenskant van de opwarmsektie wordt naar het voorbeeld van Perry (blz 11-31)

$$h_{NBC} = 0,75 \cdot h_{BC}$$

Uit een eerste berekening volgt dat een verdamper van 2 meter lengte voldoende uitwisselend oppervlak heeft.

We kunnen de warmteoverdrachtscoëfficiënten h_{BE} en h_{NBE} berekenen met gemiddelde fysische konstanten.

Hiervoor nemen we:

- De warmtecapaciteit $\bar{c}_p = 2,11 \text{ KJ/kg } ^\circ\text{C}$ (uit tabel 4)
- De dichtheid $\rho = 10^3 \text{ kg/m}^3$ (aan de hand van de produktspecificatie, lit 16)
- De viscositeit $\eta = 1,7 \text{ cp}$ bij $T = 48^\circ\text{C}$
 $\eta = 1,6 \text{ cp}$ bij $T = 65^\circ\text{C}$ (afgeschat met de figuur uit Perry, blz 3-228, uitgaande van $\eta = 2 \text{ cp}$ bij $T = 20^\circ\text{C}$)
- De warmtegeleidingscoëfficiënt wordt berekend met :

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\phi_m} \cdot \sum_i (\phi_{m,i} \lambda_i)$$

Voor beide temperaturen vindt men dat $\bar{\lambda} = 0,27 \text{ J/sm}^\circ\text{C}$ uitgaande van $\lambda = 0,18 \text{ J/sm}^\circ\text{C}$ voor organische stoffen bij die tempera-

turen.

Met deze fysische konstanten zijn:

$$h_{BE} = 3722 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C} \quad \text{en} \quad h_{NBE} = 358 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$$

Nu moet de stoomtemperatuur berekend worden. Hiervoor moet men de warmteoverdrachtscoëfficiënt voor de kondenszijde van het verdampers gedeelte berekenen. Deze is afhankelijk van het temperatuurverschil over de condensfilm ΔT_f en de lengte van het verdampers gedeelte L_2 .

Na enkele iteraties vindt men:

$$\underline{\text{stoomtemperatuur} = 115,9 \text{ }^\circ\text{C}}$$

waarbij de warmteoverdrachtscoëfficiënt $h_{BC} = 5,03 \cdot 10^3 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$ berekend met $L_2 = 1,843 \text{ m}$ en $\Delta T_f = 14,5 \text{ }^\circ\text{C}$.

De totale warmteoverdrachtscoëfficiënten zijn:

$$\underline{U_1 = 252 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}} \quad \text{en} \quad \underline{U_2 = 1,47 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}}$$

In principe moet men nu het drukverschil berekenen over het verdampers gedeelte en aan de hand hiervan een nieuw kookpunt van het vloeistofmengsel bepalen. Met dit nieuwe kookpunt kan weer een nieuwe stoomtemperatuur berekend worden. Voor ons is een correctie van het kookpunt niet zinvol daar we geen gegevens hebben over het ternaire systeem aldoxan-aceetaldehyde-water.

Aan de hand van het artikel van Kern (lit 20) werd gecontroleerd of we een annular flow hebben aan het eind van de verdampers. Dit bleek inderdaad het geval te zijn.

Berekening van de drukval in het opwarmgedeelte L_1

- Statische hoogte:

$$\Delta P = \rho g L \cdot 9,865 \cdot 10^{-6} = 0,015 \text{ atm}$$

- Drukval ten gevolge van friktie met de formule uit F.T.V. (blz 29)

$$\Delta P = L \cdot f \cdot \frac{1}{2} \cdot \bar{v}^2 \cdot \frac{4}{D} \cdot 9,865 \cdot 10^{-6} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ atm.}$$

Berekening van de drukval in het verdampers gedeelte L₂:

- Statische hoogte:

$$\Delta P = \bar{\rho}_g L \cdot 9,865 \cdot 10^{-6} = 7,8 \cdot 10^{-3} \text{ atm.}$$

waarbij

$$\bar{\rho} = \phi_m / (\bar{v} \cdot n \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D^2) = 44 \text{ kg/m}^3$$

- Drukverandering ten gevolge van de snelheidsverandering met de formule uit Perry (blz 11-32):

$$\Delta P = 473 \cdot 10^{-6} \cdot \frac{ij}{\varepsilon} \cdot \left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \cdot \left(\frac{\phi_m}{n \cdot \frac{\pi}{4} D^2} \right)^2 = 0,19 \text{ atm.}$$

waarbij de dampfractie $ij = \phi_{m,g} / \phi_m = 0,198$, $\bar{\rho}_g = 1,30$ bij $T = 65^\circ\text{C}$ en $P = 1,4$ atm. met de ideale gaswet.

- Drukval ten gevolge van friktie.

Hiervoor is het artikel van Kern gebruikt (lit 20). Ook voor gemiddelde kondities hebben we een annular flow. Met de formules uit zijn artikel volgt dat de drukval ten gevolge van friktie gelijk is aan :

$$\frac{\Delta P}{L} = 0,0224 \text{ atm/m}$$

Voor $L_2 = 1,843$ m wordt $\Delta P = 0,041$ atm.

De totale drukval over de verdamper is:

$$\underline{\underline{\Delta P = 0,25 \text{ atm.}}}$$

§7) Massa- en warmtebalans

De massa- en warmtebalans zijn weergegeven in een blokjesschema in de bijlage (blz. 55). De opbouw van de stromen uit componenten is aangegeven op blz 57.

Enige kanttekeningen hierbij:

Massabalans

- Er wordt een dusdanige hoeveelheid water toegevoegd dat de produktstroom gemakkelijk te behandelen is. Gekozen is voor 20 gew.% water in deze stroom.
- De hoeveelheid toe te voegen loog is niet goed te bepalen daar de zuurgraad van het aceetaldehyde waarvan we uitgaan niet bekend is. Bovendien reageert een hoeveelheid loog met het aceetaldehyde. Dat dit een knelpunt is merken ook Anderson en Peters (lit 15) op, die bij hun reaktiesnelheids metingen het verloop van de pH tijdens de reactie volgden. De pH daalde meestal, bleef soms redelijk konstant, en liep zelfs enkele keren op. Een verklaring hiervoor geven zij niet.

De hoeveelheid toe te voegen loog moet dus worden geschat. Dit gebeurt aan de hand van praktijkgegevens zoals die in de literatuur vermeld zijn:

Chemische Werke, Hüls (lit 1)	0,011 mol KOH/kg AcH
A. Wacker, G.m.b.H. Burghausen (lit 1)	0,059 mol NaOH/kg AcH
A.G. Höchst, Ludwigshafen (lit 1)	0,060 mol NaOH/kg AcH
Floyd. J. Metzger (lit 21)	0,103 mol NaOH/kg AcH

De waarde van Hüls is zo laag omdat in deze fabriek de reactietemperatuur hoger is (25°C). Een te hoge loogconcentratie resulteert dan in de vorming van te veel hogere polymeren.

Metzger beweert met 0,1 mol NaOH/kg AcH een pH tussen de 9 en 11 te kunnen realiseren. We kiezen dan ook voor deze hoeveelheid:

$\phi_{m,AcH} = 2,372 \text{ kg/s} \longrightarrow \phi_{m,loog} = 0,2372 \text{ mol NaOH/s}$, wat omge-
rekend betekent 0,095 kg 10 gew.% NaOH-oplossing/s.

Door de pH te meten van het,de reaktor instromende,mengsel kan
d.m.v. feed back de loog toevoer geregeld worden.

- De 3 parallele stromen door de warmtewisselaars worden als één
stroom berekend (nr 10 tot 14).

Warmtebalans

- We hebben aangenomen dat de stroom naar de reaktor (8) en de pro-
duktstroom (21) een temperatuur van 20°C hebben. We stellen daar-
om de enthalpieinhoud van de verschillende componenten bij deze
temperatuur gelijk aan 0. De stroom naar de reaktor heeft dus een
enthalpieinhoud gelijk aan 0.

De recirculatiestroom (9), waaruit de reaktorstroom o.a. is opge-
bouwd, heeft een temperatuur van 27°C. We moeten dus voor de in-
gaande stroom aceetaldehyde (1) een temperatuur lager als 20°C
aannemen:

$$(\phi_{m,1} \cdot c_{p,AcH})(T - 20) + (\phi_{m,9,AcH} c_{p,AcH} + \phi_{m,9,H_2O} c_{p,H_2O}) \cdot 7 = 0$$

waarbij de nummers de stroom aanduiden.

Uit het bovenstaande volgt $T = 17,37^\circ\text{C}$

Dit betekent tevens $Q_1 = -6,11$.

Overigens is een iets hogere temperatuur van het de reaktor in-
stromende mengsel niet bezwaarlijk. De reaktiewarmte die in de
reaktor-platen warmtewisselaar moet worden afgevoerd is vele ma-
len groter dan de warmteinhoud van het reaktiemengsel bij b.v. 25°C
Een klein temperatuursverschil zal in de reaktor snel genivel-
leerd worden

- De reaktiewarmte en warmteafvoer in de verschillende reaktorsek-
ties zijn gesommeerd aangegeven.

§8) Symbolenlijst

<u>symbol</u>	<u>omschrijving</u>	<u>dimensie</u>
A	Oppervlakte	m ²
AcH	Aceetaldehyde	
C	Aantal componenten	
c _p	Warmtecapaciteit	b.v. J/mol ^o C
d	Afstand	cm
D _i	Inwendige diameter	m
D _o	Uitwendige diameter	m
eAcH	Aceetaldehyde (totaal)	
F	Aantal vrijheidsgraden	
f	Korrektiefactor voor de drukval of friktiefactor	
g	Zwaartekracht versnelling	m/s ²
H	Enthalpie	b.v. KJ/mol
h	Partiële warmteoverdrachtscoëfficiënt	KJ/m ² s ^o C
J	Drukval per H.T.U.(Θ)	atm
K	Evenwichtskonstante	
k	Reaktiesnelheidskonstante	b.v. 1/mol s
L	Lengte	m
M	Molekuulgewicht	g
P	Druk	atm
pH	Zuurgraad (= - log(H ₃ O ⁺))	
Q	Warmtestroom	KJ/s
R ⁻	Omzettingssnelheid	mol/l s
Re	Reynolds getal (= $\rho v \cdot D/\eta$)	
T	Temperatuur	^o C
ΔT_m	Logaritmisch temperatuursverschil	
U	Totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	KJ/m ² s ^o C
V	Volume	m ³ of l
v	Snelheid	m/s

x	Molfraktie	
ϕ_m	Massastroom	kg/s
ϕ_v	Volumestroom	1/s of m ³ /hr
ϕ_w	Warmtestroom	KJ/s
ρ	Dichtheid	kg/l of kg/m ³
η	Dynamische viscositeit	1 cp = 10 ⁻³ kg/ms
λ	Warmtegeleidingscoëfficiënt	W/m °C
ξ	Conversiegraad	
ϵ	Fraktie volumeverandering bij reactie	
ϕ_j	Korrektiefactor voor de drukval	
θ	Warmteoverdrachts eenheid (T/ T _m)	

§9) Literatuuroverzicht 1

- 1) Ullmanns Encyklopädie der Technische Chemie, 3 (1953) 3^{de} druk
- 2) Landolt-Bornstein, Zahlenwerte und Funktionen, 6^{de} druk (1955)
- 3) Handbook of chemistry and Physics, 54^{ste} druk (1974)
- 4) International Critical Tables (1926)
- 5) Collegediktaat: Apparatuur voor warmteoverdracht, Ir. J. F. Clausen
- 6) Beilsteins Handbuch Der Organische Chemie, 4^{de} druk 1 (1918) 824
- 7) Beilsteins Handbuch Der Organische Chemie, 4^{de} druk, viertes Ergänzungswerk, 1(6) 3985
- 8) Winnacker-Küchler, Chemische Technologie, 3^{de} druk 4 (1972)
- 9) E. Späth, Ber. dtsh. Chem. Ges. 76 (1943) 1196-1202
- 10) E. Hanschke, Ber. dtsh. Chem. Ges. 76 (1943) 180-182
- 11) R. P. Bell and P. T. McTigue, J. Chem. Soc. (1960) 2983-2994
- 12) P. T. McTigue en L. C. Gruen, Austral. J. Chem, 17(9) (1964) 953-960
- 13) A. A. Frost and R. G. Pearson, Kinetics and Mechanism, 2^{de} druk (1961) 346
- 14) R. P. Bell, J. Chem. Soc., (1937) [2] 1637
- 15) J. B. Anderson and M. S. Peters, J. Chem. Eng. Data 5(3) (1960) 359-364
- 16) B. I. O. S. (British Intelligence Objectives Subcommittees) Final Report 1053 (1947) 76-119
- 17) D. C. Hull, U. S. Patent, P 2.428.846 (Oct 14, 1947)
- 18) Thermal Handbook van Alfa Laval
- 19) Perry, Chemical Engineers' Handbook, 4^{de} druk
- 20) Kern, Hydrocarbon Processing, 48 (1969) oct. 105
- 21) F. J. Metzger, U. S. Patent, P 2.433.524 (Dec. 30, 1947)
- 22) Norman. E. Hamner, Corrosion Data Survey (metals Section) 5^{de} druk N. A. C. E. blz 168
- 23) I. Mellan, Corrosion Resistant Materials Handbook 1966, blz 205

Literatuuroverzicht 2

Bij de berekeningen wordt verwezen naar de volgende literatuur:

- App. voor W.O. = J.F.Clausen, Apparatuur voor Warmte Overdracht
deel I en deel II
- F.T.V. = W.J.Beek, Fysische Transportverschijnselen I
- Perry = J.H.Perry, Chemical Engineers' Handbook 4^{de} druk
- V.D.I. Wärmeatlas = V.D.I. Wärmeatlas, 2^{de} druk 1974

Bijlage 1

<p>PHE Design data</p>	<p>Thermal handbook T 101</p>
-----------------------------------	--

Type	P 20	P0 ¹	P2 ¹	P 5	P 13	P 14	P3 ¹ 31 plates
Heating surface per plate (m ²)	0.031	0.032	0.12	0.14	0.18	0.32	0.32
Maximum number of plates	175	75	250	200	318	275	400
Maximum heating surface (m ²)	5.4	2.4	30	28	57	88	128
Normal plate gauge (mm)	0.5	0.6	0.6	0.8	0.9	0.7	0.6
Plate spacing (mm)	1.6—1.8	2.5	3.0	2.8—3.0	3.0—3.2	5.0	3.0
Max. temp. rubber gaskets (°C)	140	140	140	140	140	140	140
Max. temp. asbestos gaskets (°C)	280	280	280	—	—	—	280
Suitable flowrate per channel (m ³ /h)	0.05—0.15	0.14—0.25	0.45—0.7	0.36—0.9	0.9—2.2	1.8—2.9	0.7—1.25
Max. flow rate recommended (m ³ /h) ²	2.5	11	50	16	30	140	140
Max. design pressure (atg)	10	16	16	10	11	16	16

Type	P3 ¹ 32 plates	P 15	P 45	P 25	P4 ¹	P 16	P 17
Heating surface per plate (m ²)	0.38	0.53	0.55	0.61	0.75	0.81	1.42
Maximum number of plates	300	320	350	600	500	300	300
Maximum heating surface (m ²)	114	170	193	366	375	243	426
Normal plate gauge (mm)	1.0	1.0	0.6	1.0	0.6	1.1	1.1
Plate spacing (mm)	3.8—4.0	5.0—5.3	4.9	4.9—5.2	2.7	4.7—5.3	4.7—5.3
Max. temp. rubber gaskets (°C)	140	140	140	140	140	140	140
Max. temp. asbestos gaskets (°C)	—	—	—	—	280	—	—
Suitable flow rate per channel (m ³ /h)	1.45—4.0	4—8	3—5	4—10	1.1—2.5	5—12.5	5—12.5
Max. flow rate recommended (m ³ /h)	65	125	125	450	260	400	400
Max. design pressure (atg)	11	15	12	12	12	6	6

¹ PHE with crosscorrugated plates.

² Corresponding to 1.5 mwg pressure drop in portals and nozzles.

PHE Economic channel flow rates, heat transfer coefficients and heat transfer units per passage. Conditions corresponding to table T 005.	Thermal handbook T 102
--	----------------------------------

v in m³/h, channel x 10⁻³
 k in kcal/m², h, °C
 Θ in HTU/channel

Duty	side 1 side 2	Water 40°C to water 40°C or steam	Water sol. to water 40°C or steam	Mineral oil to water 40°C or steam	Mineral oil to mineral oil	Mineral oil to water 40°C or steam	Organics to water 40°C or steam	Veg. oil or organics to water 40°C or steam
Assumed physical data of fluid	ρ g/cc, kcal/m ³ , °C μ cSt λ kcal/m ² , h, °C	0.6 0.54 1000	50 0.34 950	50 0.10 480	50 0.10 480	100 0.10 480	1 0.17 480	10 0.13 480
P 20	v k Θ	130 3500 1.7	72 1050 0.93	86 450 0.57	61 215 0.45	50 380 0.97	135 1800 1.8	135 950 0.91
P 0**	v k Θ	210 3000 0.92	195 1050 0.36	220 460 0.29	175 205 0.17	175 320 0.27	255 1700 0.90	200 820 0.55
P 2**	v k Θ	650 3350 1.25	590 1100 0.47	650 490 0.38	520 240 0.23	520 370 0.36	650 1800 1.3	540 860 0.81
P 5	v k Θ	830 3000 1.0	540 770 0.45	580 310 0.31	470 165 0.20	360 245 0.40	870 1650 1.1	760 710 0.55
P 13*	v k Θ	2000 3100 0.55	1300 800 0.2	1400 290 0.16	1000 125 0.10	860 200 0.17	1850 1550 0.63	1800 780 0.33
P 3**, 31 plates	v k Θ	1150 3350 1.9	1000 1100 0.76	1100 490 0.61	870 240 0.37	870 370 0.57	1100 1800 2.1	900 860 1.3
P 3**, 32 plates	v k Θ	2700 2650 0.61	2400 860 0.25	2600 390 0.19	2100 190 0.12	2100 300 0.19	3000 1550 0.69	2700 740 0.37
P 14*	v k Θ	3400 2900 0.65	1950 670 0.23	2300 290 0.19	1450 115 0.12	1400 195 0.21	3200 1400 0.70	2900 710 0.40

* In these types insert plates on viscous liquid side gives, at same optimum conditions, higher values of v, k and Θ. A comparison between the values for PHEs with insert plates (index i pl) and PHEs with normal plates (index n pl) gives when $J_{i pl} \approx 0.5 J_{n pl}$:

$v_{i pl} \approx 0.7 v_{n pl}$, $k_{i pl} \approx 2 k_{n pl}$ and $\Theta_{i pl} \approx 3 \Theta_{n pl}$
 or $v_{i pl} \approx 0.55 v_{n pl}$, $k_{i pl} \approx 1.8 k_{n pl}$
 and $\Theta_{i pl} \approx 3.5 \Theta_{n pl}$ at equal pressure drop per pass

** PHE with herringbone pattern

Het vervolg hiervan op blz 44

N.B. Er is een fout in de tabel:

$$\rho c = \eta \approx \gamma$$

$$\gamma \approx \eta = \lambda \quad (\text{De symbolen zijn cyclisch verwisseld})$$

$$\lambda = \rho c$$

Duty	side 1	Water 40°C to water 40°C or steam	Water sol. to water 40°C or steam	Mineral oil to water 40°C or steam	Mineral oil to mineral oil	Mineral oil to water 40°C or steam	Organics to water 40°C or steam	Veg. oil or organics to water 40°C or steam
	side 2							
Assumed physical data of fluid	ρ g/cc	0.6	50	50	50	100	1	10
	ν cSt	0.54	0.34	0.10	0.10	0.10	0.17	0.13
	λ kcal/m ² h, °C	1000	950	480	480	480	480	480
P 15*	v	5400	3600	4000	3000	3500	5400	5500
	k	2800	610	250	105	180	1300	805
	Θ	0.54	0.19	0.14	0.077	0.11	0.59	0.32
P 45	v	3800	3000	3600	3000	3000	4000	4000
	k	3450	1100	530	240	330	2200	1300
	Θ	1.0	0.43	0.34	0.19	0.25	1.26	0.75
P 25*	v	7200	4000	5000	4000	4000	3000	8000
	k	2800	680	300	140	230	1750	1050
	Θ	0.42	0.21	0.15	0.087	0.14	0.55	0.33
P 4**	v	2100	1800	2000	1600	1600	2000	1600
	k	2800	1000	460	220	330	1650	770
	Θ	2.0	0.90	0.73	0.44	0.64	2.5	1.5
P 16*	v	9400	6100	6500	5000	4300	9700	9000
	k	2600	620	250	105	160	1300	700
	Θ	0.43	0.17	0.13	0.075	0.13	0.5	0.26
P 17*	v	9700	6500	6700	5400	4300	9700	9400
	k	2700	950	260	110	165	1300	720
	Θ	0.75	0.30	0.23	0.13	0.20	0.85	0.45

* In these types insert plates on viscous liquid side gives, at same optimum conditions, higher values of v , k and Θ . A comparison between the values for PHEs with insert plates (index i pl) and PHEs with normal plates (index n pl) gives when $J_{i pl} \approx 0.5 J_{n pl}$:

$v_{i pl} \approx 0.7 v_{n pl}$, $k_{i pl} \approx 2 k_{n pl}$ and $\Theta_{i pl} \approx 3 \Theta_{n pl}$

or $v_{i pl} \approx 0.55 v_{n pl}$, $k_{i pl} \approx 1.8 k_{n pl}$

and $\Theta_{i pl} \approx 3.5 \Theta_{n pl}$ at equal pressure drop per pass

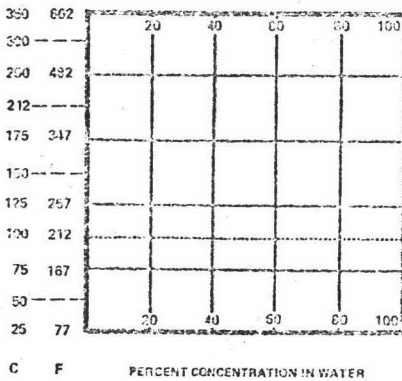
** PHE with herringbone pattern

Bijlage 2

Materiaalkeuze voor de reaktor

Uit de 2 onderstaande tabellen uit de literatuur volgt dat konstruktie staal kan worden gebruikt:

CORROSIVE	FERROUS ALLOYS				AUSTENITIC STAINLESS STEELS			Martensitic Stainless 405-410	COPPER BASE ALLOYS			
	CAST IRON			Mild Steel	302, 304, 321, 347	316, 317	AISI CN-20 20Cr-30Ni		Copper 85-99.9	Brass 70-80Cu - Zn, Sn or Pb	Brass 59-93Cu - Al, Zn or As	Cupro-Nickel 66-88 : 11-33
	Gray	Nickel	Silicon									
SODIUM HYDRO SULFIDE ① ⑦ ⑧ ①												
SODIUM HYDROXIDE ① ⑥ ②												



Code	mg/dm ² /day	g/m ² /yr	lb/ft ² /yr
ALUMINUM			
⊙	< 2.70	< 135	< 0.0234
○	< 27.00	< 1350	< 0.234
□	37.4-45.5	1870-3450	0.28-0.71
X	> 45.5	> 2275	> 0.71
COPPER, NICKEL or IRON			
⊙	< 11.9	< 435	< 0.0896
○	< 119.0	< 4350	< 0.896
□	119.0-247.5	4350-10875	0.896-2.24
X	> 247.5	> 10875	> 2.24
LEAD			
⊙	< 15.75	< 575	< 0.1178
○	< 157.5	< 5750	< 1.178
□	31.5-393.75	1150-14250	1.178-2.945
X	> 393.75	> 14250	> 2.945
TANTALUM			
⊙	< 23.05	< 843	< 0.172
○	< 230.5	< 8430	< 1.72
□	230.5-576.5	8430-21025	1.72-4.3
X	> 576.5	> 21025	> 4.3

lit.22

TABLE 92: STAINLESS STEEL, CARBON STEEL

The resistance of stainless and carbon steels to various chemicals. These are: Cooper Alloy (chromium, nickel stainless steel); Cooper Alloy 175M (chromium, nickel, molybdenum stainless steel); Cooper Alloy FA20 (nickel, chromium, copper, molybdenum stainless steel). These alloys are resistant to acids, solvents, and salt solutions of aluminum, magnesium, mercury, potassium, sodium, tin, and zinc. Reference: Norman S. Mott, Cooper Alloy Corp., Hillside, New Jersey 07205.

- Code: S = Carbon Steel should be satisfactory
 R = This alloy preferred for greater corrosion resistance, especially for stronger solutions, or when the solution may be contaminated with acidic impurities
 N = This alloy necessary for satisfactory service
 X = Not sufficiently resistant, do not use.

CORROSIVE	CARBON STEEL	Ⓐ 175	Ⓐ 175M	Ⓐ FA20	OTHER ALLOYS
Sodium hydroxide, 70°F	S	R			
Sodium hydroxide, <40>80%, 175°F	X	N		R	Monel (R)
Sodium hydroxide, 40-80%, 175°F	X	X	X	N	Monel (R)

lit.23

Bijlage 3 :Schatting van de oppervlakken van de warmtewisselaars

1) Warmtewisselaar nr H₁₅

Dit is een gewone shell-tube warmtewisselaar, waar de produktstroom stromend door de pijpen, gekoeld wordt van 80°C naar 20°C. Dit gebeurt met koelwater van 10°C (b.v. gebruikt koelwater bij de reaktor) dat wordt opgewarmd tot 65°C. Hiermee kunnen we de voeding van de verdampers opwarmen van 20°C naar 47°C.

De af te voeren warmte is met behulp van tabel B 1 te bepalen:

$$\phi_w = \sum_i (c_{p,i} \phi_{m,i}) \cdot \Delta T = 313 \text{ KJ/s}$$

Tabel B 1

	$c_{p,i} \text{ (KJ/kg}^\circ\text{C)}$	$\phi_{m,i} \text{ (kg/s)}$	$c_{p,i} \phi_{m,i}$
Aldoxan + hogere prod.	1,795	1,794	3,220
Water + natriumacetaat	4,186	0,461	1,930
Aceetaldehyde	1,250	0,059	0,074

$$\sum_i (c_{p,i} \phi_{m,i}) = 5,224 \text{ KJ/}^\circ\text{Cs}$$

Warmen we het water op van 10°C tot 65°C dan is de massastroom:

$$\phi_m = \frac{\phi_w}{c_p \cdot \Delta T} = 1,36 \text{ kg/s}$$

Als de produkt met een snelheid van 1 m/s door de buizen stroomt, kan de warmteoverdrachtscoëfficiënt berekend worden met een formule uit F.T.V. (blz 83):

$$h_1 = 0,027 \cdot \frac{\lambda}{D} (\text{Re})^{0,8} \left(\frac{c_p \eta}{\lambda} \right)^{0,33} = 1217 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$$

waarbij de fysische konstanten bij 50°C genomen zijn, zoals de viscositeit $\eta = 1,7 \text{ cp}$, afgeschat met de figuur uit Perry (blz 3-228), uitgaande van $\eta = 2 \text{ cp}$ bij 20°C.

De warmtegeleidingscoëfficiënt wordt geschat op 0,18 J/sm°C, uitgaande van $\lambda = 0,17 \text{ J/ms}^\circ\text{C}$ bij $T = 20^\circ\text{C}$

De gemiddelde warmtecapaciteit volgt uit tabel B 1 :

$$\bar{c}_p = \frac{\sum_i c_{p,i} \phi_{m,i}}{\phi_m} = 2,26 \text{ kJ/kg } ^\circ\text{C}$$

De andere warmteoverdrachtscoëfficiënten zijn:

- De buiswand $h_3 = 2,15 \cdot 10^4 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$

- De vuillagen worden afgeschat met waarden uit Perry (blz 10-20):

$$h_2 = 1000 \text{ Btu/hr sq ft } ^\circ\text{F} = 5,68 \cdot 10^3 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$h_4 = 5,68 \cdot 10^3 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

- De shell side wordt geschat op: $h_5 = 1000 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$

De totale warmteoverdrachtscoëfficiënt is nu:

$$U = \left[\frac{D_o}{D_i} \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) + \frac{1}{h_3} + \frac{1}{h_4} + \frac{1}{h_5} \right]^{-1} = 405 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Deze waarde ligt in het gebied dat de VDI-Wärmeatlas (blz C63)

geeft voor shell-tube warmtewisselaars: $U = 150-1200 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$

Uit App. voor W.O. (blz 74) volgt dat voor 6 shell passes met kruisstroom het gemiddelde temperatuurverschil

$$\Delta T_m = 0,85 \cdot \Delta T_{\log} = 10,5 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Nu kan het benodigde oppervlak berekend worden:

$$A = \frac{\phi_w}{U \cdot \Delta T_m} = 74 \text{ m}^2$$

2) Warmtewisselaar nr H₁₁

Dit is een normale shell-tube warmtewisselaar, waarin de voeding van de verdamer wordt opgewarmd van 20°C tot 47°C. Dit gebeurt met het opgewarmde koelwater van warmtewisselaar H₁₅. De voeding stroomt door de buizen. De warmtestroom wordt gevonden met behulp van tabel 4, blz 32 :

$$\phi_w = \sum_i (c_{p,i} \phi_{m,i}) \cdot \Delta T = 165 \text{ KJ/s}$$

Dit betekent voor de waterafkoeling ($\phi_m = 1,36 \text{ kg/s}$):

$$\Delta T = \phi_w / (\phi_m \cdot c_p) = 29^\circ\text{C} ,$$

dus van 65°C naar 36°C

Als de produktstroom met een snelheid van 1m/s door de buizen stroomt, kan de warmteoverdrachtscoëfficiënt berekend worden met de formule uit F.T.V. (blz 83):

$$h_1 = 0,027 \cdot \frac{\lambda}{D} (\text{Re})^{0,8} \left(\frac{c_p \eta}{\lambda} \right)^{0,33} = 1087 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$$

waarbij de fysische konstanten genomen zijn bij 34°C.

Dit betekent voor de viscositeit $\eta = 1,9 \text{ cp}$, afgeschat met de figuur uit Perry (blz 3-228), uitgaande van $\eta = 2 \text{ cp}$ bij 20°C.

Voor de warmtegeleidingscoëfficiënt wordt dezelfde waarde genomen als bij 25°C, dus $\lambda = 0,17 \text{ J/sm}^\circ\text{C}$.

De gemiddelde warmtecapaciteit volgt uit tabel 4, blz 32 :

$$\frac{\phi_w}{\phi_m} = \frac{\sum_i (c_{p,i} \phi_{m,i})}{\phi_m} = 2,11 \text{ KJ/kg }^\circ\text{C}$$

Voor de andere warmteoverdrachtscoëfficiënten worden dezelfde waarden genomen als bij de warmtewisselaar H₁₅, blz 47.

De totale warmteoverdrachtscoëfficiënt is nu:

$$U = \left[\frac{D_o}{D_i} \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) + \frac{1}{h_3} + \frac{1}{h_4} + \frac{1}{h_5} \right]^{-1} = 386 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$$

Op dezelfde manier als bij warmtewisselaar H₁₅, blz 47, wordt het gemiddelde temperatuursverschil berekend:

$$\Delta T_m = 0,85 \cdot \Delta T_{\log} = 14,5 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Nu kan het benodigde oppervlak berekend worden:

$$A = \frac{\phi_w}{U \cdot \Delta T} = 30 \text{ m}^2$$

3) De kondensor nr H₁₂

De damp met samenstelling $x_{\text{AcH}} = 0,8$ en $x_{\text{H}_2\text{O}} = 0,2$ komt de kondensor in bij 80°C en $P = 1,4$ atm. We veronderstellen dat de drukval over de kondensor nul is. Uit de T-x-figuur van water-aceetaldehyde (blz 5) volgt na opschuiving van de temperatuur as met 10°C i.v.m. de hogere druk, dat de eerste condensatie optreedt bij 70°C en de laatste bij $32,2^\circ\text{C}$. Vervolgens koelen we in hetzelfde apparaat na tot een (gekozen) temperatuur van 27°C .

We nemen aan dat het koelwater opwarmt van 20°C tot 40°C .

De benodigde hoeveelheid warmte afvoer voor condensatie en koelen tot $32,2^\circ\text{C}$, kan berekend worden met behulp van de tabellen B 2 en 5 blz 32 :

$$\phi_{w,1} = \sum_i \left\{ \phi_{m,i} (\Delta H_{1 \rightarrow v,i} + c_{p,i} \Delta T) \right\} = 466 \text{ KJ/s}$$

Tabel B 2

	$c_{p,i}$ (KJ/kg $^\circ\text{C}$)	$\phi_{m,i}$ (kg/s)	$c_{p,i} \phi_{m,i}$ (KJ/s $^\circ\text{C}$)
Aceetaldehyde	1,250	0,520	0,650
Water	4,186	0,053	0,222

$$(\phi_{m,i} c_{p,i}) = 0,872 \text{ KJ/s}^\circ\text{C}$$

De vrijkomende warmte bij het nakoelen van $32,2^\circ\text{C}$ naar 27°C kan berekend worden met behulp van tabel B :

$$\phi_{w,2} = \sum_i (\phi_{m,i} c_{p,i} \cdot \Delta T) = 4,53 \text{ KJ/s}$$

De warmteoverdrachtscoëfficiënt van het water, stromend door de buizen met een snelheid van 1 m/s, kan weer berekend worden met de formule uit F.T.V. (blz 83):

$$h_1 = 0,027 \frac{\lambda}{D} (\text{Re})^{0,8} \left(\frac{c_p \eta}{\lambda} \right)^{0,33} = 4796 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$$

waarbij de fysische konstanten bij $T = 30^\circ\text{C}$ genomen zijn. Dit bete-

kent voor de viscositeit $\eta = 0,7975$ cp (Handbook, blz F49), de warmtegeleidingscoëfficiënt $\lambda = 0,613$ J/sm²°C (Handbook, blz E4) en voor de dichtheid $\rho = 0,9957$ kg/l (Handbook, blz F11).

In App. voor W.O., tabel 15, wordt voor het kondenseren van lichte koolwaterstoffen een warmte weerstand inclusief vuil weerstand van $0,0007$ sm² °C/J gegeven.

Voor de andere warmteoverdrachtscoëfficiënten worden dezelfde waarden genomen als bij warmtewisselaar H₁₅, blz 47:

$$\text{Voor de buiswand } h_3 = 2,15 \cdot 10^4 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$\text{Voor de vuillaag aan de waterzijde } h_2 = 5,68 \cdot 10^3 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

De totale warmteoverdrachtscoëfficiënt wordt nu:

$$U_1 = \left[\frac{D_o}{D_i} \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2} \right) + \frac{1}{h_3} + \frac{1}{h_4} + \frac{1}{h_5} \right]^{-1} = 815 \text{ J/sm}^2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Deze waarde ligt binnen de grenzen die de V.D.I.-Wärmeatlas (blz Cb3) geeft: 300-1200 J/sm² °C.

Als we het koelwater van 20°C tot 40°C opwarmen, is hiervoor een massastroom nodig gelijk aan:

$$\phi_m = \frac{\phi_{w,1} + \phi_{w,2}}{c_p \cdot \Delta T} = 5,62 \text{ kg/s}$$

Bij het afkoelen van het condensaat van 32,2°C naar 27°C stijgt het koelwater:

$$\Delta T = \phi_{w,2} / (c_p \cdot \phi_m) = 0,19^\circ\text{C}$$

Hieruit volgt dat voor het kondenseren het koelwater dus van 20,2°C naar 40°C stijgt.

Voor condensatie is het gemiddelde temperatuur verschil moeilijk te schatten; uit App. voor W.O. (fig. 124.6) volgt voor 2 shell passes:

$$\Delta T_{m,1} = 0,85 \cdot \Delta T_{\log} = 20^\circ\text{C}$$

Het oppervlak voor de condensatie is nu te berekenen:

$$A_1 = \frac{\phi_{w,1}}{U_1 \cdot \Delta T_{m,1}} = 29 \text{ m}^2$$

Voor het afkoelen wordt een totale warmteoverdrachtscoëfficiënt van $U_2 = 100 \text{ J/sm}^2 \text{ }^\circ\text{C}$ genomen in verband met de lage vloeistofsnelheid aan de shell-kant. Voor het gemiddelde temperatuur verschil wordt genomen:

$$\Delta T_{m,2} = 0,5 (32,2 - 20,2) + (28 - 20) = 10^\circ\text{C}$$

Het benodigde oppervlak voor afkoelen is dus gelijk aan:

$$A_2 = \frac{\phi_{w,2}}{U_2 \cdot \Delta T_{m,2}} = 3,66 \text{ m}^2$$

Het totale benodigde oppervlak is $A = A_1 + A_2 = 33 \text{ m}^2$

Bijlage 4: Schatting drukval in de warmtewisselaars

1) Warmtewisselaar nr H₁₁

We maken gebruik van de formule uit F.T.V. (blz 29):

$$\frac{\Delta P}{L} = f \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\bar{v}^2}{D} \cdot \frac{4}{D} \cdot 9,865 \cdot 10^{-6}$$

$$Re = \left(\frac{\rho v D}{\gamma} \right) = 10^4 \quad \text{waarbij voor } v, 1 \text{ m/s aangenomen is.}$$

Nu is de friktiefactor te schatten: $4 \cdot f = 0,035$

Het aantal pijpen wordt bepaald met:

$$n \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D^2 = \frac{\phi_m}{\rho v} \quad \text{waaruit volgt } n = 9,2$$

Stel er zijn 10 pijpen, dan $v = 0,92 \text{ m/s}$ en $\frac{\Delta P}{L} = 0,0073 \text{ atm/m}$

$$L = \frac{A}{n \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D^2} = 47,7 \text{ m}$$

Hieruit volgt : $\Delta P = 0,35 \text{ atm}$

2) Warmtewisselaar nr H₁₅

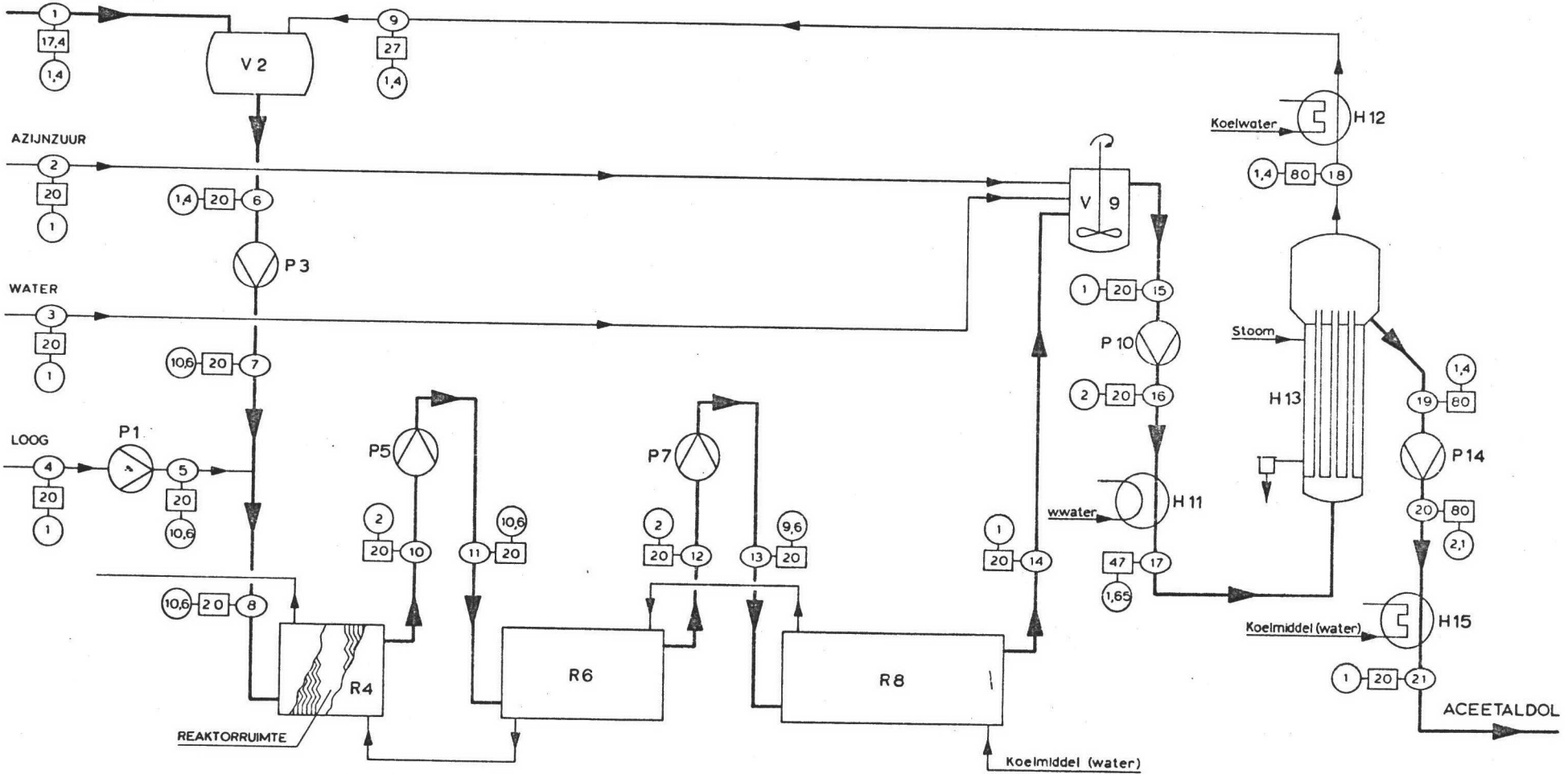
De berekening gebeurt analoog aan de bovenstaande berekening (H₁₁).

We vinden dan:

$n = 7,4$ neem 8, dan $v = 0,92 \text{ m/s}$. $L = 147 \text{ m}$ en met deze gegevens

$$\underline{\underline{\Delta P = 1,07 \text{ atm}}}$$

ACEETALDEHYDE



P 1	POMP
V 2	WACHTTANK
P 3	POMP
R 4	REAKTOR/PLATEN-WW(3PARALLEL)
P 5	POMP

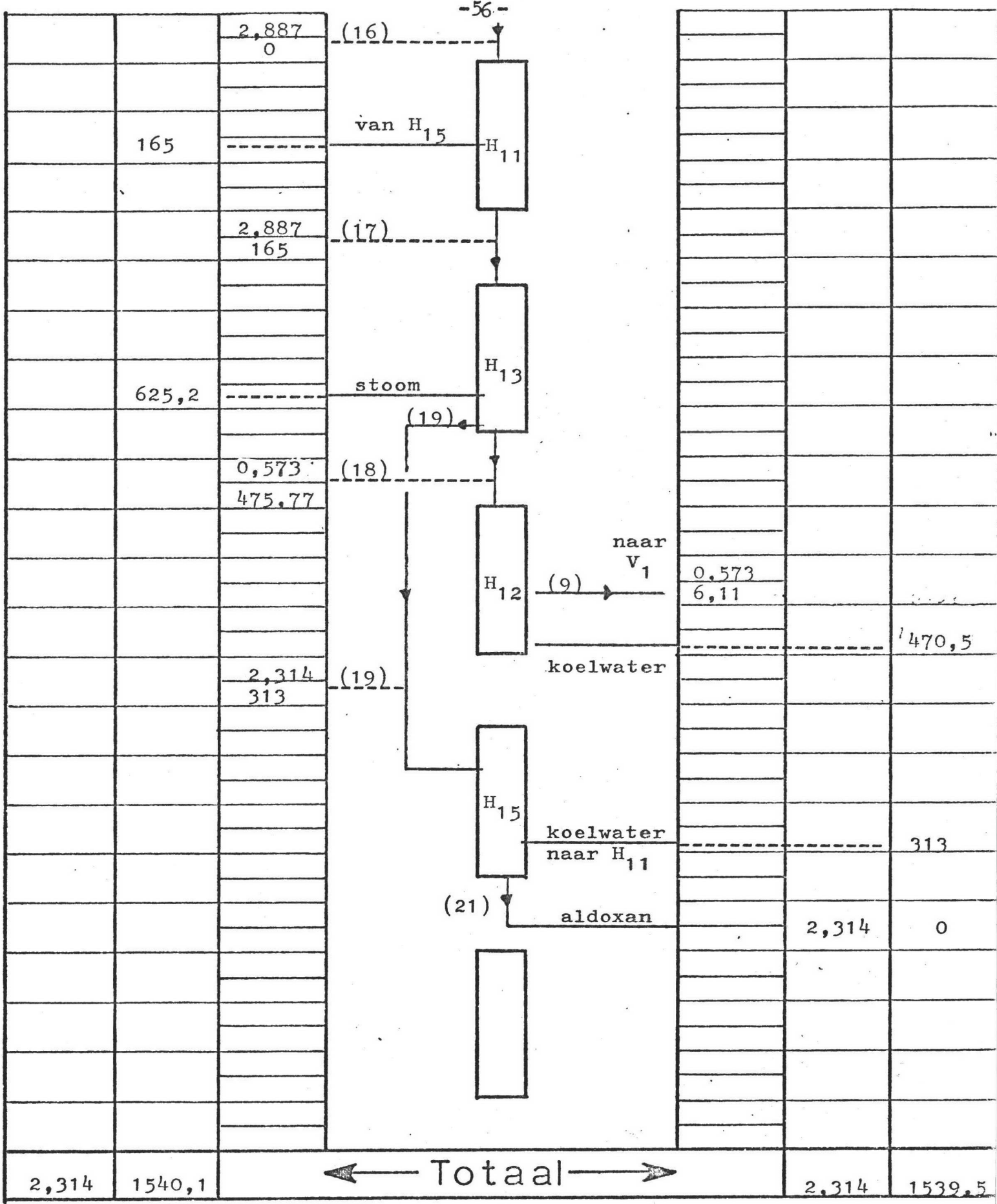
R 6	REAKTOR/PLATEN-WW(3PARALLEL)
P 7	POMP
R 8	REAKTOR/PLATEN-WW(3PARALLEL)
V 9	NEUTRALISATIE TANK
P 10	POMP

H 11	WARMTEWISSELAAR
H 12	CONDENSOR
H 13	VERDAMPERS (STIJGENDE FILM)
P 14	POMP
H 15	WARMTEWISSELAAR

SYNTHESE VAN ACEETALDOL
UIT ACEETALDEHYDE

JJ. LEGERSTEE EB. DE VRIES
APRIL 1976

○ STROOMNR. □ TEMP. IN °C ○ DRUK IN ATA



Massa in kg/s
 Warmte in kW

Fabrieksvoorontwerp
 No:

Apparaatstroom	1		2		3		4		5	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Aceetaldehyde	1,853	- 6,11								
NaOH							0,0095	0	0,0095	0
Water			0,100	0	0,252	0	0,0855	0	0,0855	0
Aziijnzuur			0,014	0						
Totaal:	1,853	- 6,11	0,114	0	0,252	0	0,095	0	0,095	0

Apparaatstroom	6		7		8		9		10	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Aceetaldehyde	2,373	0	2,373	0	2,373	0	0,520	4,55	1,775	0
NaOH					0,0095	0			0,0095	0
Water	0,053	0	0,053	0	0,1385	0	0,053	1,56	0,1385	0
Aldoxan + H.P.									0,598	0
Totaal:	2,426	0	2,426	0	2,521	0	0,573	6,11	2,521	0

M in kg/s
Q in kW

Stroom/Componenten staat

Apparaatstroom	11		12		13		14		15	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Aceetaldehyde	1,775	0	1,177	0	1,177	0	0,579	0	0,579	0
NaOH	0,0095	0	0,0095	0	0,0095	0	0,0095	0		
Water	0,1385	0	0,1385	0	0,1385	0	0,1385	0	0,4945	0
Aldoxan+H.P.	0,598	0	1,196	0	1,196	0	1,794	0	1,794	0
Zouten									0,0195	0
Totaal:	2,521	0	2,521	0	2,521	0	2,521	0	2,887	0

Apparaatstroom	16		17		18		19		20	
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Aceetaldehyde	0,579	0	0,579	19,55	0,520	343	0,059	4,44	0,059	4,44
Water	0,4945	0	0,4945	55,90	0,053	133,3	0,4415	110,9	0,4415	110,9
Aldoxan+H.P.	1,794	0	1,794	86,95			1,794	193,2	1,795	193,2
Zouten	0,0195	0	0,0195	2,21			0,0195	4,90	0,0195	4,90
Totaal:	2,887	0	2,887	165	0,573	476,6	2,314	313	2,314	313

M in kg/s
Q in kW

Stroom/Componenten staat

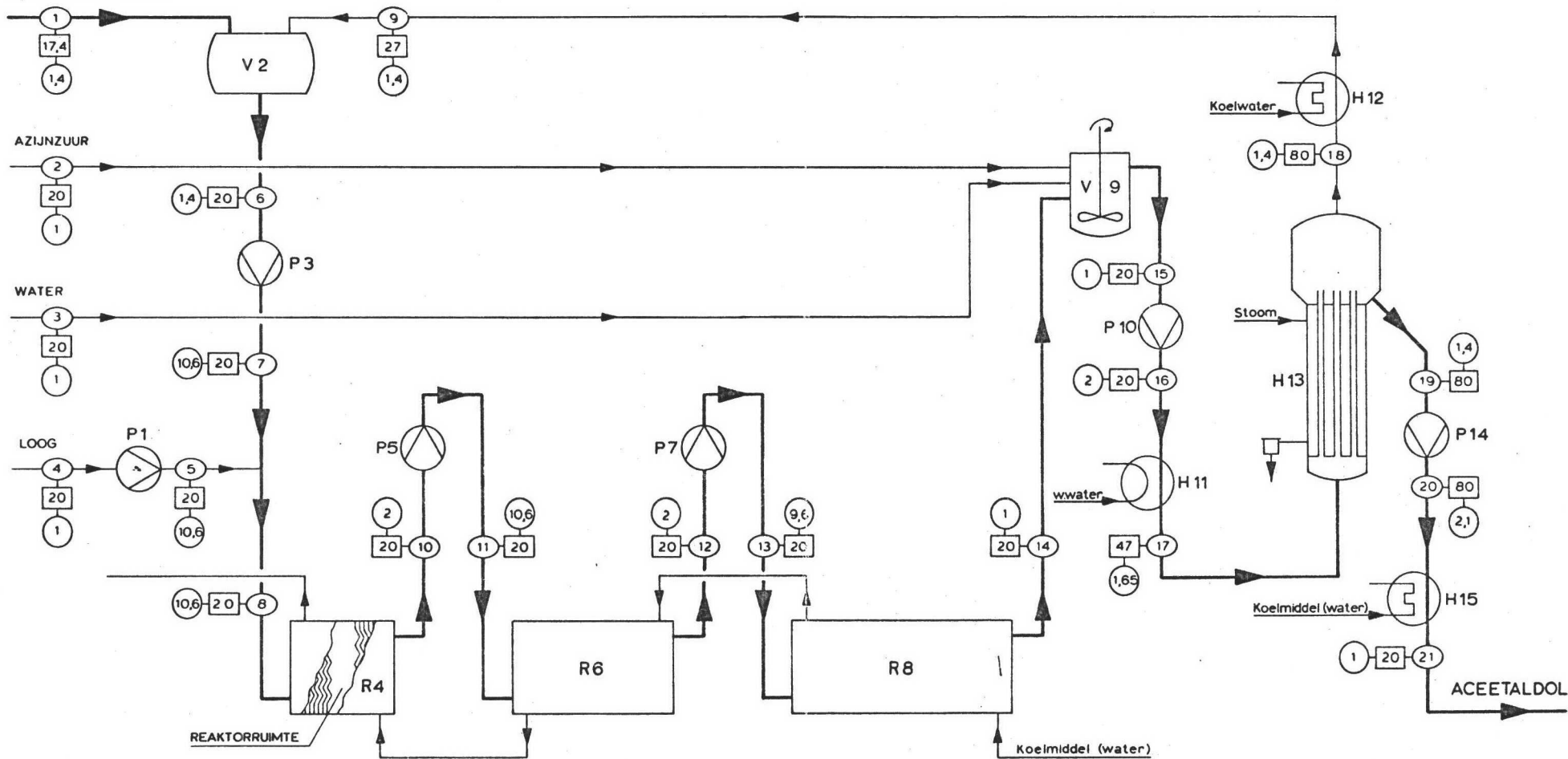
Apparaatstroom	21									
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Aceetaldehyde	0,059	0								
Water	0,4415	0								
Aldoxan	1,736	0								
Hogere Prod.	0,058	0								
Zouten	0,0195	0								
Totaal:	2,314	0								

Apparaatstroom										
↓ Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
Totaal:										

M in kg/s
Q in kW

Stroom/Componenten staat

ACEETALDEHYDE



P 1	POMP
V 2	WACHTTANK
P 3	POMP
R 4	REAKTOR/PLATEN-WW.(3PARALLEL)
P 5	POMP

R 6	REAKTOR/PLATEN-WW.(3PARALLEL)
P 7	POMP
R 8	REAKTOR/PLATEN-WW.(3PARALLEL)
V 9	NEUTRALISATIETANK
P 10	POMP

H 11	WARMTEWISSELAAR
H 12	CONDENSOR
H 13	VERDAMPER (STIJGENDE FILM)
P 14	POMP
H 15	WARMTEWISSELAAR

**SYNTHESE VAN ACEETALDOL
UIT ACEETALDEHYDE**

JJ. LEGERSTEE EB. DE VRIES

APRIL 1976

○ STROOMNR. □ TEMP. IN °C ○ DRUK IN ATA



