

24 Aug 93  
09.30

F.V.O. Nr.: 2930

R. Louwe Kooijmans en W.P. Wolterbeek

---

**De produktie van  
aceetaldehyde door middel van het  
Wacker-tweestaps-proces  
vanuit etheen en lucht**

Verslag behorende bij het fabrieksvoorontwerp

Opdrachtdatum : september 1991  
Verslagdatum : augustus 1993

 **TU Delft**

Technische Universiteit Delft

Faculteit der Scheikundige Technologie en der Materiaalkunde

**De produktie van  
aceetaldehyde door middel van het  
Wacker-tweestaps-proces  
vanuit etheen en lucht**

R.Louwe Kooijmans  
Columbusstraat 89  
2561 AH Den Haag  
tel.: 070 - 3625561

W.P.Wolterbeek  
Spoorsingel 43<sup>a</sup>  
2613 BG Delft  
tel.: 015 - 134638

Opdrachtdatum: september 1991  
Verslagdatum: augustus 1993



## SAMENVATTING

In dit fabrieksvoorontwerp wordt de produktie van aceetaldehyde via homogene oxidatie van etheen met zuurstof behandeld. De gebruikte route staat beter bekend als het tweestaps Wacker proces. In de eerste stap wordt etheen met behulp van een opgeloste palladium/koper-katalysator geoxideerd tot aceetaldehyde. De reactie vindt plaats in de vloeistoffase bij 110 °C en 11 atm. De conversie per pass bedraagt 98 % voor etheen met een selectiviteit van 95 % naar aceetaldehyde. Als bijprodukten ontstaan azijnzuur, ethylchloride en chlooraceetaldehyde. In de tweede stap wordt de gereduceerde katalysator met behulp van zuurstof uit lucht gereoxideerd. Ook deze reactie vindt plaats in de vloeistoffase en wel bij 115 °C en 12 atm. De conversie per pass van zuurstof bedraagt 95 %.

Bij een beschikbaarheid van 91 % wordt er per jaar 107 kton aceetaldehyde geproduceerd. De inerte gassen uit de luchtstroom worden na de reoxidatiereactor gescheiden van de katalysatorstroom. Deze stroom, die voornamelijk stikstof bevat wordt hierna gestript van gechloreerde stoffen en ontstaat daarna als waardevol produkt (143.9 kton/jaar). De geproduceerde aceetaldehyde wordt vervolgens een scheidings- en opwerkingssectie ingevoerd waar het wordt opgewerkt tot een zuiverheid van 99 %.

De totale investeringen voor het productieproces worden geschat op 117 miljoen gulden. De Rate on Investment (ROI) op deze investering bedraagt 46.9 % voor een bezetting van 100 % en 41.5 % voor een bezetting van 90 %. De Internal Rate of Return is bepaald op 44.7 %.

**INHOUDSOPGAVE**

	Bladzijde
1. Inleiding .....	5
2. Uitgangspunten voor het fabrieksontwerp .....	6
2.1 Capaciteit .....	6
2.2 Beschikbaarheid .....	6
2.3 Stofgegevens .....	6
2.4 Corrosiviteit .....	6
2.5 Explosiegevaar .....	7
2.6 Toxiciteit .....	7
2.7 Keuzemotivatie proces-route .....	8
3. Procesbeschrijving .....	9
3.1 De voeding .....	9
3.2 De katalysatorcyclus .....	9
3.3 De opwerking van acetaldehyde .....	10
3.4 De afvalstromen .....	10
4. Procescondities .....	11
4.1 Het reactiemechanisme en de kinetiek .....	11
4.1.1 Alkeenoxidatiereactor .....	11
4.1.2 Reoxidatiereactor .....	13
4.2 Thermodynamica .....	13
4.3 De reactoren .....	15
4.4 De scheidingscondities .....	15
4.5 De overige apparatuur .....	16
5. Motivering van de apparatuur .....	17
5.1 De reactoren .....	17
5.2 Overige apparatuur .....	17
5.2.1 Destillatiekolommen .....	17
5.2.2 Absorptiekolom .....	17
5.2.3 Warmtewisselaars, condensoren en reboilers .....	17
5.2.4 Vaten .....	19
5.2.5 Pompen en compressoren .....	19
6. Massa- en warmtebalans .....	20
7. Overzicht specificatie apparatuur .....	31

	Bladzijde
8. <b>Kosten</b> .....	49
8.1 <b>Investerings</b> .....	49
8.1.1 Schatting van de investeringen met de Taylormethode .	50
8.1.2 Schatting van de investeringen met de Millermethode .	50
8.1.3 Vergelijking van beide schattingsmodellen .....	52
8.2 <b>Kosten</b> .....	53
8.3 <b>Inkomsten</b> .....	54
8.4 <b>Rentabiliteit</b> .....	55
9. <b>Alternatieve processen</b> .....	56
10. <b>Conclusie</b> .....	57
11. <b>Symbolenlijst</b> .....	58
12. <b>Literatuurlijst</b> .....	63

**Bijlagen:**

- A     zuivere stofgegevens
  
- B     dimensionering van de apparaten
  - B.1 reactoren
  - B.2 destillatietorens
  - B.3 absorptiekolommen
  - B.4 warmtewisselaars, condensoren en reboilers
  - B.5 accumulatoren en scheidingsvaten
  
- C     berekeningen economische aspecten
  - C.1 schatting van investeringen volgens Taylor
  - C.2 schatting van investeringen volgens Miller
  - C.3 grondstoffen en hulpmiddelen  $K_p$
  - C.4 inkomsten  $F$
  - C.5 bepaling Return on Investment ROI
  - C.6 bepaling Internal Rate of Return IRR

## 1. INLEIDING

Dit fabrieksvoorontwerp betreft de produktie van aceetaldehyde door de homogene oxidatie van etheen met zuurstof in een waterige katalysatoroplossing.

Aceetaldehyde is een belangrijk tussenprodukt in de industriële organische syntheses. De toepassingen zijn de produktie van azijnzuur en zijn derivaten, zoals esters en plastics, n-butanol, 2-ethylhexanol, en andere aldolprodukten, azijnzuuranhydride, pentaerythritol, pyridines, chloral, etc.

De vier hoofdroutes, die gebruikt worden voor de produktie zijn:

- dehydrogenatie van ethanol, dat op zijn beurt verkregen is uit ethyleen (etheen) of uit fermentatie van carbohydraten.
- hydratatie van acetyleen (ethyn).
- gasfase oxidatie van koolwaterstoffen, butaan, propyleen of lichte nafta, waarin aceetaldehyde één van de vele bijprodukten is.
- directe oxidatie van ethyleen (homogeen).

Deze homogene oxidatie is uit te voeren op twee manieren:

- **one-stage:** directe oxidatie van etheen met zuivere zuurstof tot aceetaldehyde. Hierbij bevinden beide uitgangsstoffen zich in één en dezelfde reactor. De reactie wordt gekatalyseerd door een palladium/koper-complex.
- **two-stage:** indirecte oxidatie van etheen met zuurstof tot aceetaldehyde. In dit geval komen beide stoffen niet in aanraking met elkaar; etheen wordt geoxideerd door een palladium/koper-complex, dat in een tweede reactor gereduceerd wordt door zuurstof uit lucht. Het 'two stage' proces staat beter bekend als het **Wacker-proces** en is tevens de route waarvoor gekozen is.

Andere productie-processen van aceetaldehyde zijn de volgende [*Kirk-Othmer, 1960; Miller, 1969*]:

- oxidatie van ethanol met zuurstof
- dehydrogenatie van ethanol
- hydratatie van ethyn (acetyleen)
- direct uit synthese-gas ( $\text{CO} + \text{H}_2$ )

## **2. UITGANGSPUNTEN VOOR HET FABRIEKSVORONTWERP**

### **2.1 Capaciteit**

De fabriek heeft een capaciteit van 100.000 ton acetaldehyde per jaar.

### **2.2 Beschikbaarheid**

Voor het fabrieksontwerp is van 8000 bedrijfsuren per jaar uitgegaan, zodat de fabriek een beschikbaarheid van 91 % heeft.

### **2.3 Stofgegevens**

De zuivere stofgegevens van de uitgangsstoffen, hulpstoffen, tussen- en eindproducten zijn opgenomen in bijlage A. Voor deze gegevens diende de componentenbibliotheek van het flowsheeting pakket ChemCad als basis.

### **2.4 Corrosiviteit**

De katalysator-oplossing die wordt gebruikt is een electrolyt-oplossing en bevat  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{H}^+$ ,  $\text{Pd}^{2+}$ ,  $\text{Cl}^-$  en diverse geladen complexen hiervan en complexen met etheen. Dit geheel is zeer corrosief en daarom wordt voor de apparaten waardoor deze oplossing stroomt gebruik gemaakt van een titanium coating.

Titanium is resistent tegen chloride oplossingen; het is niet bestand tegen droog chloor, maar een lage vochtigheids-concentratie van 0.01% zal corrosie voorkomen. De resistentie van titanium hangt namelijk af van de formatie van een oxide film op het metaal. (Alloying met palladium 0.15% verbetert aanzienlijk de corrosie-weerstand vooral ten opzichte van HCl.) Aangezien de katalysator zich in een waterige oplossing bevindt, is de formatie van droog chloor niet aanwezig.

Volgens Mellan [1971] heeft titanium lining voor alle in het proces voorkomende componenten een corrosiesnelheid die kleiner is dan 5 mpy ( $= 5 \cdot 10^{-3}$  inch per jaar). Ter vergelijking: de corrosie-gevoelige apparaten zijn bekleed met  $40 \cdot 10^{-3}$  inch titanium.

Acetaldehyde zelf is corrosief, evenals azijnzuur. Deze stoffen doorlopen vrijwel het gehele proces. Hierdoor wordt de rest van de apparaten uitgevoerd in AISI RVS 304 en plaatstelijk zelfs in AISI RVS 316.

## 2.5 Explosiegevaar

Voor de procesveiligheid moet er zorg gedragen worden dat nergens in het proces explosieve mengsels gevormd kunnen worden. Explosieve mengsels die eventueel zouden kunnen optreden zijn [*Kirk-Othmer, 1960*]:

- etheen met zuurstof: de lower explosion limit (LEL) is 2.7 vol-% in zuurstof en de upper explosion limit (UEL) is 80 vol-% in zuurstof, terwijl de LEL 2.7 vol-% in lucht en de UEL 34 vol-% in lucht is bij 1 bar.
- acetaldehyde met zuurstof: de LEL is 4 vol-% in zuurstof en de UEL 93 vol-% in zuurstof, terwijl de LEL 4.5 vol-% in lucht is en de UEL 60.5 vol-% in lucht bij een 400 J detonator.

Aan deze voorwaarden wordt bij het two-stage proces makkelijk voldaan aangezien door inhibitie van stikstof in lucht de explosiegrenzen dichterbij elkaar komen te liggen. Ook het voorkomen van het contact tussen etheen en zuurstof, en acetaldehyde en zuurstof zorgt ervoor dat deze explosies niet kunnen plaatsvinden. Het enig mogelijke contact is tussen opgelost etheen en opgeloste zuurstof, hetgeen geen gevaar vormt.

## 2.6 Toxiciteit

Naast de sterk corrosieve eigenschappen van een aantal stoffen zijn veel van deze stoffen schadelijk voor de gezondheid. In *Chemiekaarten [1989]* staan de MAC-waarden voor deze stoffen voor zover aanwezig vermeld en weergegeven in tabel 2.1. Hierin staat ook de klasse vermeld waarin de stof is ingedeeld door de Nederlandse emissie richtlijnen [*1992*]. Deze deelt de organische gassen op in 3 klassen:

- Klasse gO.1 Bij een lozing van  $\phi_m > 0.1$  kg/hr is de  $C_{cis} = 20$  mg/Nm<sup>3</sup>
- Klasse gO.2 Bij een lozing van  $\phi_m > 2.0$  kg/hr is de  $C_{cis} = 100$  mg/Nm<sup>3</sup>
- Klasse gO.3 Bij een lozing van  $\phi_m > 3.0$  kg/hr is de  $C_{cis} = 150$  mg/Nm<sup>3</sup>

Bij constatering van overtreding van deze normen is het niet zozeer het geval dat er een boet kan worden opgelegd maar is er eerder kans op dwang tot sanering.

Tabel 2.1: MAC-waarden en NER-klasse van de gebruikte stoffen.

Stof	MAC-waarde		NER-klasse
	ppm	mg/m <sup>3</sup>	
Aceetaldehyde	100	180	gO.1
Azijnzuur	-	-	gO.2
Waterstofchloride	5	7	gO.1
Ethylchloride	1000	2600	gO.3
Chlooraceetaldehyde	-	-	gO.1

## 2.7 Keuze motivatie proces-route

In het **one-stage** proces wordt etheen in overmaat (wegens explosiegevaar) en pure zuurstof in contact gebracht met de katalysatoroplossing. Vanwege deze overmaat moet het resterende gedeelte etheen gerecycled worden. De katalysator-oplossing blijft voornamelijk in de reactor en wordt in situ weer geoxideerd. De beide voedingsstromen moeten zeer zuiver ( $O_2$ : 99.5% en  $C_2H_4$ : 99.8%) zijn, omdat door de recyclestroom ophoping van gas-onzuiverheden in het systeem plaatsvindt en er dus gespuid moet worden, hetgeen zorgt voor een verlies aan reactanten en produkten. Werken met pure zuurstof brengt extra kosten voor productie en opslag met zich mee.

In het **two-stage** proces wordt etheen eerst met de katalysator-oplossing in contact gebracht, waarbij de katalysator gereduceerd wordt en etheen vrijwel volledig weggeageerd. Vervolgens wordt in een andere reactor de katalysator-oplossing gereoxideerd door lucht. Hier treedt geen explosiegevaar op. Een vrij zuivere stikstofstroom wordt verkregen. De hierbij gebruikte lucht moet echter wel op de reactiedruk worden gebracht hetgeen extra compressiekosten met zich mee brengt. Aangezien er geen gasrecyclestroom is, kan er gebruik worden gemaakt van een minder zuivere etheen-voedingsstroom (>95%).

Uit bovenstaande beschrijving van beide processen en omdat het two-stage proces minder bijproduct-vorming en een kleinere maar geconcentreerde afvalwaterstroom heeft is hier gekozen voor het two-stage proces. In de praktijk worden beide processen in gelijke mate toegepast.

### **3. PROCESBESCHRIJVING**

Het proces zal worden beschreven aan de hand van het processchema, dat ondergebracht is in figuur 3.1.

#### **3.1 De voeding**

De voeding van het proces bestaat uit een redelijk zuivere etheenstroom (95-100%) met het restant aan ethaan en kan afkomstig zijn van een kraakinstallatie. Het proces werkt zeer flexibel op deze voedingsstroom en zou zelfs kunnen werken met conversie van laagpercentage-etheen (30-40%); wel moeten dan enkele structurele veranderingen worden toegepast en de katalysatorsamenstelling is iets anders, maar het zou mogelijk zijn.

De zuurstof wordt geleverd in de vorm van lucht. Het proces zou ook op zuivere zuurstof kunnen werken, maar het gebruik van zuivere zuurstof is alleen aan te raden als het in de omgeving geproduceerd wordt. De kosten zouden anders aanzienlijk hoger zijn, waardoor de 'one-stage' route financieel aantrekkelijker wordt.

Aan de katalysator-oplossing wordt een zoutzuur-oplossing toe gevoerd om het verlies aan chloride, via vluchtige bijproducten, aan te vullen.

#### **3.2 De katalysatorcyclus**

De katalysator-oplossing bestaat uit een waterige oplossing van palladium(II)-chloride, koper(I)chloride, koper(II)chloride, zoutzuur en azijnzuur. De oplossing wordt rondgepompt tussen twee reactoren; in de alkeenoxidatiereactor wordt de op druk gebrachte etheen geoxideerd tot acetaldehyde en tevens koper(II)zouten uit de katalysator-oplossing gereduceerd tot koper(I)zouten. Hierna worden de zouten in de reoxidatiereactor weer gereoxideerd door zuurstof uit lucht zodat de katalysator-oplossing haar oorspronkelijke samenstelling weer heeft om een nieuwe cyclus te beginnen. De reactiewarmte van de exotherme reacties wordt hoofdzakelijk afgevoerd door de verdamping van water zodat de temperatuur in de reactoren constant blijft.

Na de alkeenoxidatie-reactor wordt acetaldehyde en andere vluchtige stoffen (etheen, enkele reactie-producten en geproduceerd stoom door de reactiewarmte) uit de katalysator-oplossing verwijderd door te flashen in een striptoren. De druk in de alkeenoxidatiereactor wordt gehandhaafd door een smoorklep aan of nabij het afvoereinde van de reactor. De vluchtige gassen worden gevoerd naar een productterugwin- en zuiveringssysteem. In de striptoren wordt tevens het verlies aan water gecompenseerd door water toe te voegen om de concentratie van de zouten in de katalysator-oplossing constant te houden. Voordat de gereduceerde katalysator-oplossing de reoxidatiereactor ingevoerd wordt, wordt een kleine hoeveelheid zoutzuur-oplossing toegevoegd om het verlies van chloride door gechlorideerde bijproducten te compenseren. Het geheel wordt via een pomp en een warmtewisselaar op de reactiecondities gebracht.

Na de reoxidatiereactor wordt de gasfase, inert, ongereageerd zuurstof en stoom, van de katalysator-oplossing gescheiden via een hoge druk gas/vloeistof-scheider en is de katalysator-oplossing klaar voor een volgende cyclus.



Weinig vluchtige bijproducten hopen zich op in de katalysator-oplossing. Om deze te verwijderen kan een klein deel van de katalysator-oplossing aan het proces onttrokken worden [Miller, 1969]. Dit gedeelte wordt naar 160°C verhit waarbij door decompositie van deze bijproducten de katalysator gereinigd wordt. Hierdoor wordt een stationaire concentratie van de bijproducten in de katalysator-oplossing verkregen welke de hoofdreactie niet beïnvloedt. Deze zelfreiniging is verantwoordelijk voor de praktisch oneindige levensduur van de katalysator. Omdat in de modellering een beperkt aantal bijproducten is gebruikt is deze regeneratiestap in de simulatie weggelaten.

### 3.3 De opwerking van aceetaldehyde

De gasstroom die van de katalysator-oplossing gestript is, wordt naar een crude-destillatietoren gevoerd. Hier wordt de aceetaldehyde afgedestilleerd zodanig dat de aceetaldehyde-concentratie sterk verhoogd wordt. Hierbij wordt voornamelijk water verwijderd. De geconcentreerde aceetaldehyde-stroom wordt opgevangen in een 'crude'-aceetaldehyde-opslagvat. Tevens wordt in de crude-destillatietoren een restant off-gas verwijderd. Voor deze destillatie wordt gebruik gemaakt van de reactiewarmte. Het water wordt tevens opgevangen in een opslagvat en wordt vervolgens voor een deel terug de striptoren ingevoerd en voor een deel gebruikt voor het strippen van de afgasstromen.

De 'crude' aceetaldehyde wordt opgezuiverd in een twee-staps-destillatie. In de eerste destillatiekolom worden de vluchtigere stoffen dan aceetaldehyde verwijderd en in de tweede kolom wordt aceetaldehyde gescheiden van stoffen met een hoger kookpunt. De gechlorideerde bijproducten accumuleren in de tweede kolom en worden via een side-cut aan het proces onttrokken. De over de top verkregen gasstroom wordt gekoeld in een condensor, zodat een vloeibare aceetaldehydestroom wordt verkregen.

### 3.4 De afvalstromen

De afgasstromen uit de hoge druk scheider en uit de crude-destillatietoren bevatten naast stikstof ook kleine hoeveelheden andere stoffen zoals aceetaldehyde, HCl en gechlorideerde bijproducten. Deze stromen moeten worden gescrubbed met water, zodat de hoge druk stikstofstroom eventueel verder benut kan worden en de andere afgasstroom afgefakkeld kunnen worden.

De andere afvalstromen ontstaan bij het opwerken van aceetaldehyde (light-ends, heavy-ends en gechlorideerd bijproduct). De light-ends worden na bewerking afgefakkeld. De heavy-ends bestaan uit water en azijnzuur. Deze stroom dient voor lozing geneutraliseerd te worden. De gechlorideerde bijproducten moeten verder behandeld worden, voordat deze geloosd kunnen worden.

## 4. PROCESCONDITIES

### 4.1 Kinetiek en Reactiemechanismen

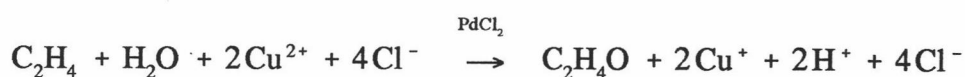
Acetaldehyde wordt gesynthetiseerd uit etheen en zuurstof volgens:



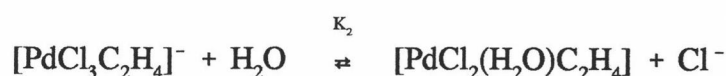
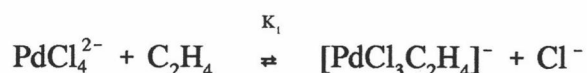
De reactiewarmte bedraagt -244 kJ/mol. Deze reactie vindt plaats in twee reactoren. In de eerste reactor wordt etheen geoxideerd met behulp van een katalysator-oplossing. In de tweede reactor wordt deze katalysator-oplossing weer geregenereerd.

#### 4.1.1 Alkeenoxidatiereactor

De vorming van acetaldehyde uit etheen via oxidatie in een homogene waterfase vindt plaats via een complex mechanisme. De optredende hoofdreactie is:



Deze reactie verloopt echter via een aantal deelstappen [Henry, 1964,1966,1968; Smidt, 1962; Moiseev, 1970,1971,1974]:



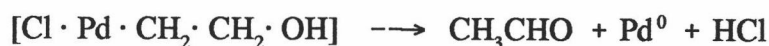
Interne omlegging tot een  $\sigma$ -complex levert:



wat via de snelheidsbepalende (langzaamste) stap:



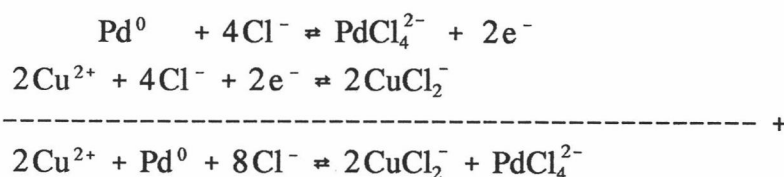
wordt gevolgd door een snelle decompositie:



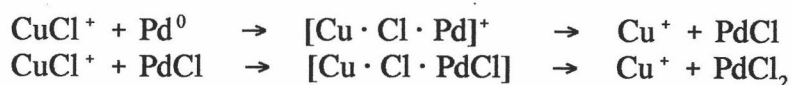
waarbij acetaldehyde wordt gevormd. Het gereduceerde palladium wordt weer in situ geoxideerd door  $\text{CuCl}_2$ :



Omdat dit thermodynamisch niet mogelijk is met vrije of gehydrateerde koperionen verloopt deze oxidatie via de volgende redoxstappen [Miller, 1969]:



waarbij tweewaardig koper (cupri) wordt omgezet in eenwaardig koper (cupro). Dit gebeurt in twee stappen :



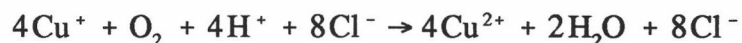
De oxidatie van het metallisch palladium verloopt vele malen sneller dan de vorming van acetaldehyde. Hierdoor wordt de reactiesnelheidsvergelijking:

$$-\frac{d[\text{C}_2\text{H}_4]}{dt} = \frac{k_1 K_1 K_2 K_3 [\text{PdCl}_4^{2-}][\text{C}_2\text{H}_4]}{[\text{Cl}^-]^2 [\text{H}_3\text{O}^+]} \quad (4.1)$$

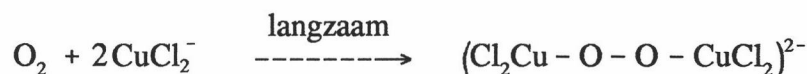
Verhoging van de concentratie chloride-ionen verlaagt de reactiesnelheid. Om dit effect door het gebruik van koperchloride te voorkomen kan een gedeelte van de  $\text{CuCl}_2$  vervangen worden door  $\text{Cu}(\text{OAc})_2$ . Aangezien het acetaat-ion niet complexeert met de katalysator wordt de reactiesnelheid verhoogd. De overall-reactie kan verlopen met een lage concentratie palladiumchloride indien er een relatief hoge concentratie  $\text{Cu}^{2+}$ -ionen aanwezig is. Hierdoor is het onmogelijk voor het palladium om te precipiteren.

#### 4.1.2 Reoxidatiereactor

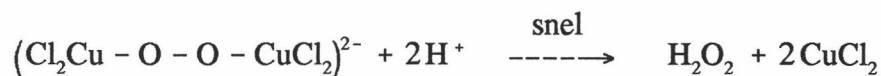
In de reoxidatiereactor wordt de gereduceerde katalysator oplossing met behulp van zuurstof geoxideerd. De optredende reactie wordt gegeven door:



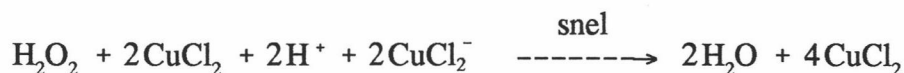
Deze reactie vindt plaats in de volgende deelstappen [Jhaveri en Sharma, 1967] :



Dit complex valt snel uiteen volgens:



waarna de gevormde peroxide snel naar water wordt omgezet:



De snelheid wordt bepaald door de langzaamste reactiestap. Hieruit volgt dat de reactiesnelheid recht evenredig is met de zuurstof-concentratie in de oplossing.

#### 4.2 Thermodynamica

Er dient gerekend te worden aan een gas- en vloeistoffase. De vloeistoffase bevat electrolyten (zouten uit de katalysator-oplossing). Het flowsheetsimulatiepakket ASPEN+ heeft hiervoor een electrolyt-NRTL model (Non Random Two Liquid). Voor dit model zijn echter voor ieder ion-ion paar interactieparameters nodig. Deze parameters zijn niet standaard opgenomen in het pakket. Deze kunnen uit oplosbaarheidsdata gefit worden, maar deze data is voor de gebruikte componenten niet of in de verkeerde vorm aanwezig. Hierdoor wordt dit model gereduceerd tot het normale NRTL model en wordt er niet meer met ion-effecten rekening gehouden. Omdat ASPEN+ erg rekenintensief is en verder geen andere voordelen biedt ten opzichte van andere beschikbare pakketten is gekozen voor een ander flowsheet-programma, namelijk ChemCad II versie 2.50. Er is in dit pakket gerekend met het NRTL model. Het NRTL model berekent fasenevenwichten met behulp van vloeistof activiteitscoëfficiënten. Binaire interactie-parameters zijn gebruikt, voor zover deze aanwezig waren in het pakket of gefit aan evenwichtsdata [Dechema, 1979]. De fugaciteitscoëfficiënten van de gasfase werden berekend met het SRK model (Soave-Redlich-Kwong). In de HCl-absorbers T17 en T21 is in plaats van het NRTL model de PPAQ methode (Partial Pressures of Aqueous Mixtures) gebruikt.

Hierbij wordt gebruik gemaakt van een tabel of formule om de dampspanning van HCl en water te verkrijgen en zo de verdeling over de vloeistof- en gasfase te berekenen [Perry, 1984]. Dit model beschrijft de verdeling van HCl over de gas en vloeistoffase beter dan het NRTL model.

Enthalpiën zijn berekend met het Latent Heat model. Hierbij wordt rekening gehouden met de verdampingswarmte en wordt de enthalpie berekend volgens:

$$H^L = \int_0^T C_{p,L}(T) dT \quad (4.2)$$

$$H^V = \int_0^{T_{dew}} C_{p,L} dT + H_{vap}(T_{dew}) + \int_{T_{dew}}^T C_{p,V} dT \quad (4.3)$$

waarin:

$H^L$	: Enthalpie vloeistof	[J/mol]
$H^V$	: Enthalpie gas	[J/mol]
$H_{vap}$	: Verdampingswarmte	[J/mol]
$C_{p,L}$	: Warmtecapaciteit vloeistof	[J/mol/K]
$C_{p,V}$	: Warmtecapaciteit gas	[J/mol/K]
$T$	: Temperatuur	[K]

De totale energie van de stroom wordt berekend volgens:

$$H^{totaal} = \sum_i x_i H_i^L + \sum_i y_i H_i^V \quad (4.4)$$

waarin:

$H^{totaal}$	: totale enthalpie	[J/mol]
$x_i$	: molfractie component i in de vloeistoffase	[-]
$y_i$	: molfractie component i in de gasfase	[-]

### 4.3 De reactoren

In een buisreactor vindt de oxidatie van etheen naar aceetaldehyde plaats. De uitgangsstof, 99% zuivere etheen, lost grotendeels op in de waterfase mede door de hoge druk van 10 atm, waarbij de reactie verloopt. De conversie op etheen is 95% naar aceetaldehyde. Er worden ook een tweetal soorten bijproducten gevormd. De eerste soort ontstaat direct uit etheen, zoals ethylchloride en chloorethanol. De tweede soort ontstaat door vervolgreactie van aceetaldehyde, zoals azijnzuur, gechloteerde aceetaldehydes en oxaalzuur. Om deze bijproducten te modelleren is gebruik gemaakt van de vereenvoudiging dat van het ongereageerde etheen 20% naar azijnzuur, 20% naar chlooraceetaldehyde en 20% naar ethylchloride wordt omgezet.

De reactiewarmte van de exotherme omzetting naar aceetaldehyde wordt opgenomen door verdamping van een gedeelte van de waterige oplossing. De reactie verloopt adiabatisch en om en nabij het kookpunt van de oplossing (110°C) bij 11 atm. Indien er een 'hotspot' optreedt, kan een grotere hoeveelheid water verdampen en zo een veilig in de hand te houden reactie plaatsvinden.

De tweede reactor, waar de katalysator weer wordt gereoxideerd door lucht, is tevens een buisreactor. De reactie verloopt bij 12 atm en 115°C. De zuurstof lost onder deze omstandigheden goed op en door de aanwezigheid van de grote hoeveelheid inerte stof (N<sub>2</sub>) is er geen explosiegevaar. De zuurstof reageert voor 95% weg en de katalysator-oplossing is na de reoxidatiereactor weer in de oorspronkelijke vorm. De door de reactie gevormde warmte wordt ook hier opgenomen door verdamping van een gedeelte van de waterige oplossing.

### 4.4 De scheidingcondities

De flashkolom, die de geproduceerde aceetaldehyde en stoom van de katalysator-oplossing scheidt, werkt adiabatisch bij 1.5 atm en 101°C. De uitgaande gasstroom bevat een grote hoeveelheid stoom. De temperatuur kan niet veel lager genomen worden aangezien dan een grote hoeveelheid aceetaldehyde in de oplossing achterblijft. Omdat de volumestroom van het gas erg groot is, is deze moeilijk te verwerken. Om een goede scheiding te bewerkstelligen dient de gassnelheid laag te zijn. Hieruit volgt een groot volume voor de flashkolom.

De hoge-druk gas/vloeistofscheider werkt adiabatisch bij 11 atm en 110.5°C, zodat de katalysator-oplossing de juiste samenstelling, druk en temperatuur heeft om naar de alkeenoxidatiereactor geleid te worden.

De crude-destillatietoren opereert bij 1.5 atm. De topstroom wordt bij 5°C gedeeltelijk gecondenseerd. Bij deze temperatuur condenseert nog bijna al het aceetaldehyde. De warmte wordt geleverd door open stoom onder in de toren.

De light-ends-destillatiekolom werkt bij 1.5 atm. Hier is de optimale top-temperatuur 2.7°C. Aceetaldehyde komt onderin de toren uit. De warmte wordt geleverd via een reboiler.

De heavy-ends-destillatiekolom werkt bij 1.5 atm. De warmte wordt geleverd door open stoom. De aceetaldehyde-stroom wordt bij 30°C gecondenseerd. De gechloteerde

bijprodukten worden via een 'side-cut' uit de kolom verwijderd bij een temperatuur van 99.7°C.

De hoge-druk-absorptiekolom werkt bij 11 atm en de lage-druk-absorptiekolom bij 1.5 atm.

#### **4.5 De overige apparatuur**

Om de voedingsstromen op de reactorcondities te brengen worden de etheen/ethaan stroom en de luchtstroom op druk gebracht met behulp van een centrifugaal compressor. De katalysator-stroom wordt nadat het product door middel van atmosferisch flashen is verwijderd weer op druk gebracht met een pomp (titanium coating). Verder wordt water dat uit de crude-destillatietoren komt op druk gebracht voor gebruik in de hoge druk HCl-absorptiekolom door middel van een centrifugaal pomp .



## **5. MOTIVERING VAN DE APPARATUUR**

### **5.1 De reactoren**

De reactoren zijn langwerpige buisreactoren, die bestaan uit een reeks verticaal opgestelde buizen, die met U-bochten verbonden zijn om een langwerpige reactiepad te vormen voor het mengsel van gas en vloeistof die in gelijkstroom daardoor gevoerd worden [NL-patent nr 7603252 / 7509689]. Vanwege de grootte van de volumestromen is gebruik gemaakt van parallelle buizen. De reactoren zijn uitgevoerd in AISI RVS 316 staal, dat gelined is met titanium. In bijlage B.1 zijn de reactoren gedimensioneerd. De belangrijkste resultaten van de berekeningen zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "Overzicht specificatie apparatuur".

### **5.2 Overige apparatuur**

#### **5.2.1 Destillatiekolommen**

Het aantal trappen en de schotelprofielen van de destillatiekolommen zijn uitgerekend met behulp van ChemCad. De torens zijn uitgerust met zeefplaten. De methode voor de dimensionering van de kolommen is verkregen uit Krishna [1991]. De belangrijkste resultaten van de berekeningen met de methode zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "Overzicht specificatie apparatuur". De berekeningen zijn uitgevoerd met behulp van MathCad en staan in bijlage B.2. De berekeningen zijn zo uitgevoerd dat door enkele instelparameters zoals de schotelafstand en de verhouding van de lengte van de overlooprand en het actief schoteloppervlak een optimale schotelbelasting wordt verkregen. De gassnelheid is ingesteld op 80% van flooding. De kolom is vervaardigd uit AISI RVS 304, vanwege de corrosiviteit van acetaldehyde en enkele andere stoffen.

#### **5.2.2 Absorptiekolommen**

De profielen in de absorptiekolommen zijn verkregen uit ChemCad. De pakking in de kolommen bestaat uit 50 mm keramische Raschig ringen. Er worden keramische ringen gebruikt vanwege de corrosiviteit van HCl. De methode voor de dimensionering van de kolommen is verkregen uit Krishna [1991]. De belangrijkste resultaten van de berekeningen met de methode zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "Overzicht specificatie apparatuur". De berekeningen zijn uitgevoerd met behulp van MathCad en staan in bijlage B.3. De kolom is vervaardigd uit AISI RVS 304, vanwege de corrosiviteit van acetaldehyde en enkele andere stoffen.

#### **5.2.3 Warmtewisselaars, condensoren en reboilers**

Voor het ontwerpen van de warmtewisselaars, condensoren en reboilers is gebruik gemaakt van de Kern-procedure [Coulson en Richardson, 1991].

De belangrijkste resultaten van de berekeningen zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "Overzicht specificatie apparatuur".

De warmtewisselaars zijn van het type "shell - tubes". In de regel wordt gebruik gemaakt van de warmtewisselaar met fixed-tubes, aangezien deze het goedkoopst is; Indien beide warmtewisselende media corrosief zijn, wordt er gebruik gemaakt van een warmtewisselaar van het floating-head type. De buizen worden in een driehoekig patroon gerangschikt.



In bijlage B.4 is de gevolgde route tot de uiteindelijke dimensionering ondergebracht. De berekeningen werden uitgevoerd met behulp van MathCad, waarvan een voorbeeld in bijlage B.4 staat.

Het meest vervuilende en/of corrosieve medium wordt door de buizen geleid, aangezien deze veel makkelijker schoongemaakt kunnen worden. In de buizen mag de snelheid van het medium groter worden dan in de mantel, zodat de vervuiling beter in de hand te houden is.

Indien koelwater gebruikt wordt als koelend medium, mag de temperatuur niet hoger worden dan 37°C, aangezien boven deze temperatuur afzetting van ketelsteen begint. Deze afzetting verlaagt de warmteoverdracht en daarmee de werking van de warmtewisselaar.

Het ontwerp moet voldoen aan de volgende randvoorwaarden: De snelheden van het medium moet voor de buizen tussen 1 en 2.5 m/s liggen en voor de mantel tussen 0.3 en 1 m/s. Dit in verband met de drukval, erosie, warmteoverdracht en vervuiling. De ruimte tussen de baffles is in de orde van 0.3 tot 0.5 maal de manteldiameter (Optimum tussen betere warmteoverdracht en de hogere drukval). De drukval over de buizen mag maximaal 0.5 bar en aan de mantelzijde eveneens maximaal 0.5 bar bedragen. Dit in verband met de verhoging van het te leveren pompvermogen.

De condensoren worden gedimensioneerd via de Kern-methode, waarbij het warmtetransport plaatsvindt via filmcondensatie [*Coulson en Richardson, 1991*].

Het condenserende medium stroomt in principe aan de mantelzijde, tenzij het condenserende medium corrosief is. De positie van de condensor is bij mantelcondensatie horizontaal en bij buiscondensatie verticaal. Als koelmedium wordt gebruik gemaakt van koelwater (H11), brine pekewater voor de condensatie van acetaldehyde (H24) en vloeibaar ammonia voor de condensatie van de crude-acetaldehydestroom (H10). Ammonia is hier gebruikt vanwege het kookpunt (-8.9°C) ten opzichte van de top-temperatuur van de crude-destillatie (5°C). Deze temperatuur zou verhoogd kunnen worden, maar dit gaat ten koste van de zuiverheid van het topproduct, wat verder in het proces opgezuiverd moet worden.

De reboiler (T19) is van het type thermosyphon. Door de mantel wordt condenserend stoom geleid, dat voor de benodigde warmte zorgt. In de buizen wordt de processtroom verdampt. Het mechanisme voor warmtetransport dat gebruikt wordt is convectieve boiling [*Coulson en Richardson, 1991*].

De warmtewisselaars in de katalysatorloop zijn vervaardigd uit AISI RVS 316 staal gelined met 0.04 inch titanium. Deze lining is nodig voor de corrosieve katalysatorzouten. Onder de lining is AISI RVS 316 staal gebruik voor de veiligheid; er zou ook een lagere staalsoort gebruikt kunnen worden, aangezien dit staal niet in contact staat met de processtroom. Voor de overige warmtewisselaars is gebruik gemaakt van AISI RVS 304. Dit is nodig in plaats van koolstofstaal, vanwege de corrosiviteit van acetaldehyde en enkele andere stoffen.

#### **5.2.4 Vaten**

De methode voor de dimensionering van de vaten is verkregen uit *Evans [1974]*. De belangrijkste resultaten van de berekeningen met de methode zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "*Overzicht specificatie apparatuur*". De berekeningen zijn uitgevoerd met behulp van MathCad en een voorbeeld staat in bijlage B.5.

Bij de dimensionering van de vaten moet rekening gehouden worden met de volgende zaken: voor gas/vloeistofscheiders moet een voldoende lage snelheid verschaft worden zodat een effectieve vloeistof/gas scheiding plaatsvindt en er geen 'entrainment' optreedt. Verder moet er voldoende volume aanwezig zijn om eventuele variaties in de in- en uitgaande stromen op te kunnen vangen.

De twee gas/vloeistofscheiders V4 en V9 zijn horizontaal geplaatst. Beide scheiders zijn gemaakt van AISI RVS 316 staal gelined met titanium, vanwege de corrosieve katalysatorzouten.

De twee opslagtanks V13 en V15 dienen als opvang indien er in de fabriek een misoperatie (storing of blokkering) plaatsvindt. In deze vaten kunnen voor 30 minuten de processtromen worden opgevangen. De vaten zijn vervaardigd uit AISI RVS 304 staal.

De twee accumulatoren V13 en V25 dienen voor de reflux in respectievelijk T12 en T22. Accumulator V13 is tevens een gas/vloeistofscheider. De accumulatoren zijn vervaardigd uit AISI RVS 304.

#### **5.2.5 Pompen en compressoren**

De belangrijkste resultaten van pompen en compressoren zijn ondergebracht in hoofdstuk 7, "*Overzicht specificatie apparatuur*".

In het proces zijn twee pompen gesimuleerd, namelijk P8 en P23. In het werkelijke proces zijn veel meer pompen geplaatst - onder andere voor het rondpompen van de refluxstroom en de produktstromen van de destillatietorens - maar deze zijn niet meegenomen in de modellering.

Pomp P8 is een centrifugaalpomp die zorgt voor het rondpompen van de katalysatoroplossing. De pomp is gemaakt van AISI RVS 316 staal bekleed met titanium.

Pomp P23 is een centrifugaalpomp, die de absorbens waterstroom van 1.5 atm. naar 11 atm. brengt voordat deze de hoge-druk absorptiekolom T21 in gaat. Deze pomp is gemaakt van AISI RVS 316.

In het proces staan twee voedingscompressoren C2 en C3. In compressor C2 wordt de etheenvoeding op de procesdruk van 11 atm. gebracht. C2 is van het type één-staps-centrifugaal-compressor, vervaardigd van gietijzer. Compressor C3 brengt atmosferische lucht in twee stappen op een procesdruk van 12 atm., waarbij tussen de twee stappen wordt gekoeld. C3 is een twee-staps-centrifugaalcompressor vervaardigd uit gietstaal.

## **6. MASSA- EN WARMTEBALANS**

De massa- en warmteinhoud van de belangrijkste stromen staan in de blokschema's op de volgende bladzijden (blz. 21 t/m 25). Na de blokschema's zijn de tabellen met de samenstelling van de stromen weergegeven (blz. 26 t/m 30).

### **Opmerkingen omtrend de balansen:**

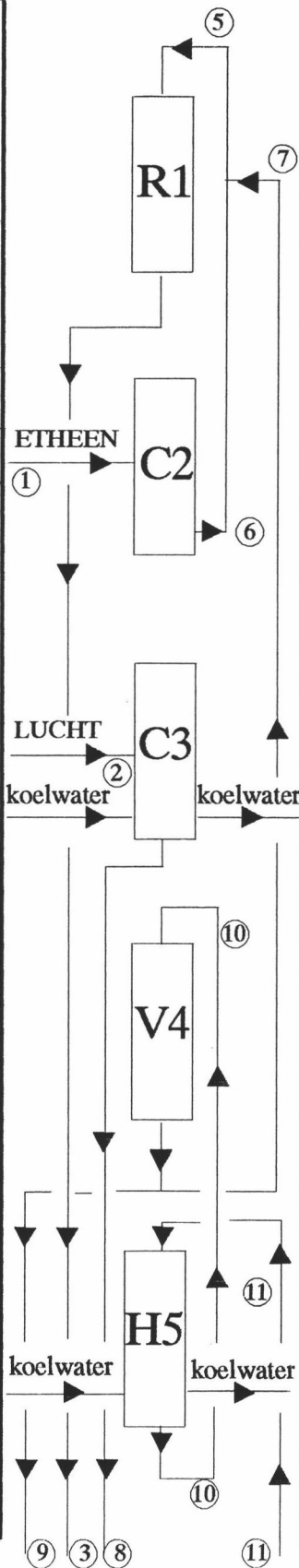
Bij het gebruikte simulatiepakket ChemCad wordt bij het itereren naar convergerende recycle stromen een hogere prioriteit gegeven aan het kloppend krijgen van de massabalansen dan aan het kloppend krijgen van de warmtebalansen. Dit leidt tot een grotere fout in de totale warmtebalans. De massabalans is kloppend op afrondingen na.

Over de warmtebalans valt nog een aantal zaken op te merken:

- De reactiewarmte wordt niet meegenomen in de simulatie. Enthalpiën van de in- en uitgaande stromen worden berekend aan de hand van de samenstellingen en temperaturen van de stromen (in het blokschema is dit onder de blokjes 'reactiewarmte' meegenomen).
- Omdat bij V9 de flash-temperatuur is vastgezet en deze lager is dan de ingaande stroom treden hier ook energieverliezen op. Dit is in minder mate ook het geval bij V4 (in het blokschema is dit onder de blokjes 'verlies' meegenomen).
- Er is met twee verschillende evenwichtsmodellen (NRTL en PPAQ) gewerkt. Hierdoor treden er discontinuïteiten op in de warmtebalans.

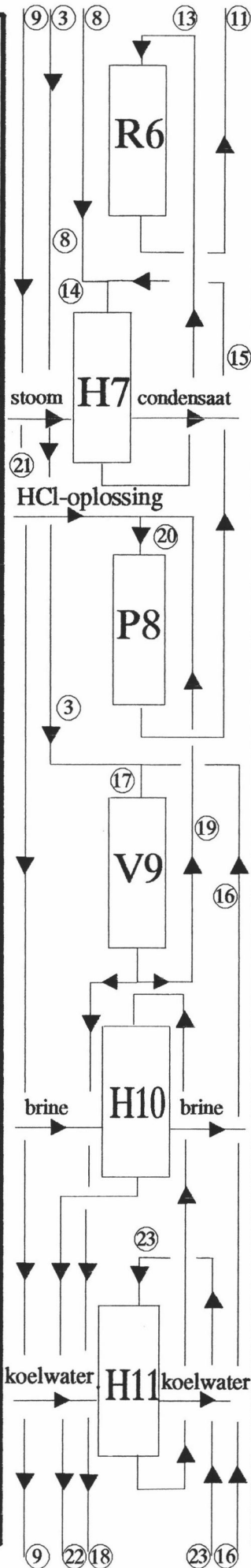
IN		Voorwaarts
M	Q	M Q
Reactie warmte	37780	
	320.8	
2.52	1951.0	
	2148.2	
6.39	3663.7	
11.34	12898	
68.27	77639.7	

Massa- en Warmtebalans



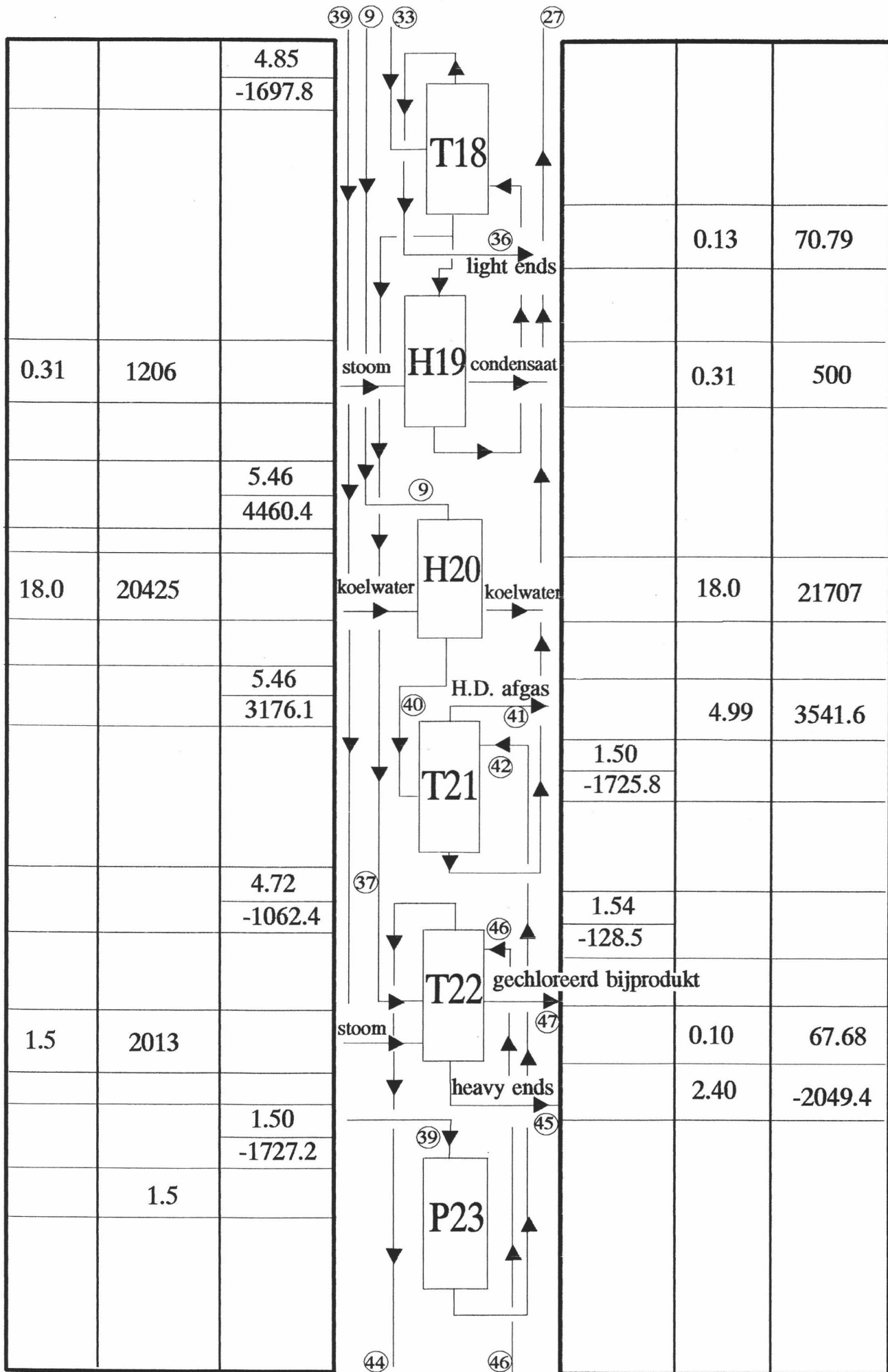
Retour	UIT	
M Q	M	Q
298.52		
-291294		
295.99		
-293544		
2.52		
2271.8		
	11.34	13705
301.45		
-289070	Verlies	13.6
301.45		
-284195		
	68.27	82514.3

		6.39
		5004.8
		301.45
		-258926
7.01	27275	
0.54	-571.1	
		295.06
		-264347
	415.7	
		298.52
		-253514
		302.08
		-256549
1.58	-170.2	
129.1	146820	



301.45		
-242935		
	Reactie warmte	41260
295.06	7.01	11284
-263931		
294.52		
-263776	Verlies	315
3.56		
-3034.6		
	1.58	1874.8
10.47		
7624.1		
	129.1	156040

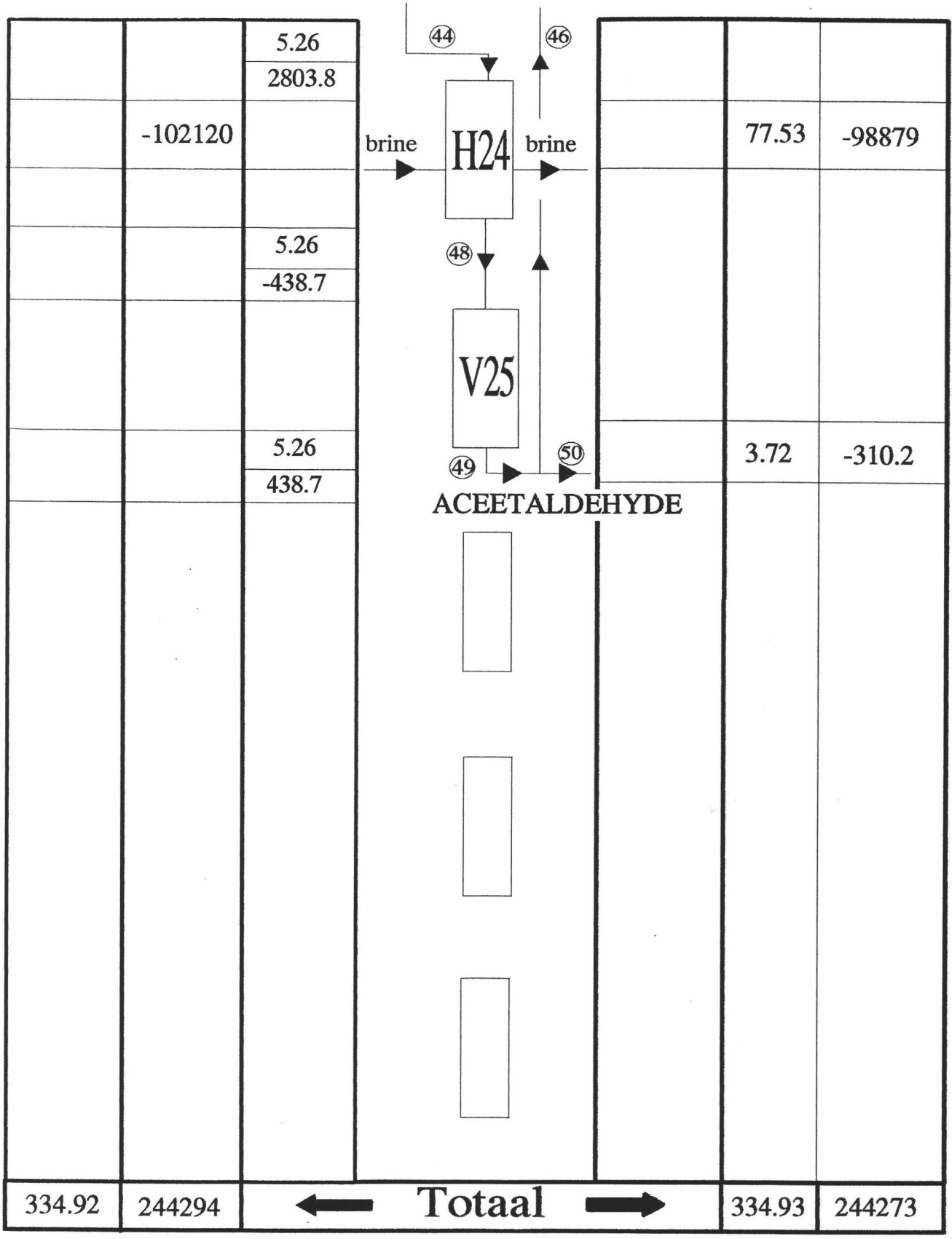




		4.85
		-1697.8
0.31	1206	
		5.46
		4460.4
18.0	20425	
		5.46
		3176.1
		4.72
		-1062.4
1.5	2013	
		1.50
		-1727.2
	1.5	

	0.13	70.79
	0.31	500
	18.0	21707
	4.99	3541.6
	1.50	
	-1725.8	
	1.54	
	-128.5	
	0.10	67.68
	2.40	-2049.4





Massa in kg/s  
 Warmte in kW



Apparaatstroom Componenten	1		2		3		4		5	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0		0.008		223.327		223.327		224.896	
aceetaldehyde	0		0		3.7818		3.7818		0.0618	
ethyleen	2.4937		0		0.0499		0.0499		2.4937	
ethaan	0.0267		0		0.0267		0.0267		0.0267	
azijnzuur	0		0		29.5655		29.5655		29.5121	
ethylchloride	0		0		0.0586		0.0586		0.0012	
chloroaceetaldehyde	0		0		0.0788		0.0788		0.0091	
waterstofchloride	0		0		7.3503		7.3503		0.9979	
palladiumchloride	0		0		0.4136		0.4136		0.4136	
cupro(I)chloride	0		0		20.1717		20.1717		2.7496	
cupri(II)chloride	0		0		13.6829		13.6829		37.3442	
stikstof	0		4.8206		0.0097		0.0097		0.0097	
zuurstof	0		1.4773		0.001		0.001		0.001	
argon	0		0.0819		0.0012		0.0012		0.0012	
kooldioxide	0		0.0039		0.0005		0.0005		0.0005	
<b>TOTAAL :</b>	2.5204	1951.04	6.3917	3663.74	298.5192	-253514	298.5192	-253527	298.5183	-291294

M in kg/s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom Componenten	6		7		8		9		10	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0		224.873		0.008		0.4873		225.359	
aceetaldehyde	0		0.0618		0		0.0021		0.0639	
ethyleen	2.4937		2.057E-06		0		0.0001		0.0001	
ethaan	0.0267		9.847E-07		0		5.167E-05		5.265E-05	
azijnzuur	0		29.5271		0		0.0047		29.5315	
ethylchloride	0		0.0012		0		0.0006		0.0013	
chloroaceetaldehyde	0		0.0091		0		0.0054		0.0145	
waterstofchloride	0		0.9979		0		0.0001		0.998	
palladiumchloride	0		0.4136		0		0		0.4136	
cupro(I)chloride	0		2.7496		0		0		2.7496	
cupri(II)chloride	0		37.3442		0		0		37.3442	
stikstof	0		0.0097		4.8206		4.811		4.8206	
zuurstof	0		0.001		1.4773		0.0683		0.0693	
argon	0		0.0012		0.0819		0.0807		0.0819	
kooldioxide	0		0.0005		0.0039		0.0034		0.0039	
<b>TOTAAL :</b>	2.5204	2271.8	295.9899	-293544	6.3917	5004.76	5.4638	4460.35	301.4515	-289070

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
water	225.359		225.359		223.774		223.774		223.766	
aceetaldehyde	0.0639		0.0639		0.0639		0.0639		0.0639	
ethyleen	0.0001		0.0001		0.0001		0.0001		0.0001	
ethaan	5.265E-05		5.265E-05		5.265E-05		5.265E-05		5.265E-05	
azijnzuur	29.5315		29.5315		29.5315		29.5315		29.5315	
ethylchloride	0.0013		0.0013		0.0013		0.0013		0.0013	
chloroaceetaldehyde	0.0145		0.0145		0.0145		0.0145		0.0145	
waterstofchloride	0.998		0.998		7.4151		7.4151		7.4151	
palladiumchloride	0.4136		0.4136		0.4136		0.4136		0.4136	
cupro(I)chloride	2.7496		2.7496		20.1717		20.1717		20.1717	
cupri(II)chloride	37.3442		37.3442		13.6829		13.6829		13.6829	
stikstof	4.8206		4.8206		4.8206		4.8206		1.803E-06	
zuurstof	0.0693		0.0693		1.4773		1.4773		1.545E-06	
argon	0.0819		0.0819		0.0819		0.0819		1.641E-06	
kooldioxide	0.0039		0.0039		0.0039		0.0039		7.283E-06	
<b>TOTAAL :</b>	301.4515	-284195	301.4515	-284193	301.4524	-242935	301.4524	-258926	295.0607	-263931

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom	16		17		18		19		20	
Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	3.5054		226.832		3.542		223.292		223.766	
aceetaldehyde	0.0016		3.7834		3.7195		0.0639		0.0639	
ethyleen	0		0.0499		0.0498		0.0001		0.0001	
ethaan	9.452E-06		0.0267		0.0267		5.265E-05		5.265E-05	
azijnzuur	0.0538		29.6193		0.0878		29.5321		29.5315	
ethylchloride	0		0.0586		0.0573		0.0013		0.0013	
chloroaceetaldehyde	0.0012		0.08		0.0655		0.0145		0.0145	
waterstofchloride	0.0019		7.3522		0.0017		7.3504		7.4151	
palladiumchloride	0		0.4136		0		0.4136		0.4136	
cupro(I)chloride	0		20.1717		0		20.1717		20.1717	
cupri(II)chloride	0		13.6829		0		13.6829		13.6829	
stikstof	0		0.0097		0.0097		1.803E-06		1.803E-06	
zuurstof	0		0.001		0.001		1.545E-06		1.545E-06	
argon	0		0.0012		0.0012		1.641E-06		1.641E-06	
kooldioxide	0		0.0005		0.0005		7.283E-06		7.283E-06	
<b>TOTAAL :</b>	3.5639	-3034.62	302.0827	-256549	7.5627	6911.96	294.5226	-263776	295.0607	-264347

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom	21		22		23		24		25	
Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0.4755		1.9215		1.9215		5.9654		1.0294	
aceetaldehyde	0		8.0215		8.0215		0.0027		4.2928	
ethyleen	0		0.1039		0.1039		0		0.0542	
ethaan	0		0.0562		0.0562		1.608E-05		0.0295	
azijnzuur	0		0.0832		0.0832		0.0916		0.0446	
ethylchloride	0		0.1230		0.1230		2.404E-11		0.0657	
chloroaceetaldehyde	0		0.1503		0.1503		0.002		0.0805	
waterstofchloride	0.0647		3.894E-07		3.894E-07		0.0032		2.086E-07	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	0		0.0097		0.0097		0		0.0001	
zuurstof	0		0.0011		0.0011		0		1.853E-05	
argon	0		0.0012		0.0012		0		2.206E-05	
kooldioxide	0		0.0010		0.0010		0		0.0005	
<b>TOTAAL :</b>	0.5402	-571.101	10.4726	-3641.67	10.4726	7624.13	6.0649	-5175.14	5.5973	-1959.33

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom	26		27		28		29		30	
Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0.9835		1.9315		5.9654		6.06E-05		1.9214	
aceetaldehyde	0.0094		0.0025		0.0027		0.0089		8.0126	
ethyleen	1.02E-06		2.53E-09		0		0.0028		0.1011	
ethaan	2.925E-07		1.014E-09		1.608E-05		0.0011		0.0551	
azijnzuur	0.0151		0.0273		0.0916		8.308E-07		0.0833	
ethylchloride	2.516E-05		3.837E-07		2.404E-11		0.0004		0.1226	
chloroaceetaldehyde	0.0003		0.0059		0.002		1.117E-05		0.1503	
waterstofchloride	0.0005		0.0009		0.0032		3.65E-13		3.894E-07	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	2.242E-07		9.413E-06		0		0.0096		0.0002	
zuurstof	5.054E-07		2.165E-06		0		0.001		3.459E-05	
argon	5.023E-07		2.315E-06		0		0.0012		4.117E-05	
kooldioxide	3.491E-07		1.936E-06		0		2.768E-05		0.0009	
<b>TOTAAL :</b>	1.0088	-1148.38	1.9681	-2091.14	6.0649	-5175.14	0.0251	15.4592	10.4475	-3657.13

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom	31		32		33		34		35	
Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0.892		2.4597		0.892		0.0005		0.9834	
aceetaldehyde	3.7198		0.0011		3.7198		1.863E-06		0.0005	
ethyleen	0.0469		0		0.0469		0.0028		0	
ethaan	0.0256		6.632E-06		0.0256		0.0011		2.653E-06	
azijnzuur	0.0387		0.0378		0.0387		0		0.0151	
ethylchloride	0.0569		0		0.0569		0.0004		0	
chloroaceetaldehyde	0.0698		0.0008		0.0698		0		0.0003	
waterstofchloride	1.808E-07		0.0013		1.808E-07		4.203E-09		0.0005	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	7.5E-05		0		7.5E-05		0.0096		0	
zuurstof	1.606E-05		0		1.606E-05		0.001		0	
argon	1.911E-05		0		1.911E-05		0.0011		0	
kooldioxide	0.0004		0		0.0004		2.733E-05		0	
<b>TOTAAL :</b>	4.8502	-1697.8	2.5007	-2133.86	4.8502	-1697.8	0.0165	12.1214	0.9998	-1151.51

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom	36		37		38		39		40	
Componenten	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0.0003		0.8917		2.4597		1.4758		0.4873	
aceetaldehyde	0.0001		3.7196		0.0011		0.0007		0.0021	
ethyleen	0.0469		1.512E-06		0		0		0.0001	
ethaan	0.0251		0.0005		6.632E-06		3.98E-06		5.167E-05	
azijnzuur	0		0.0387		0.0378		0.0227		0.0047	
ethylchloride	0.0569		0		0		0		5.746E-05	
chloroaceetaldehyde	0		0.0698		0.0008		0.0005		0.0054	
waterstofchloride	0		1.808E-07		0.0013		0.0008		0.0001	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	7.5E-05		0		0		0		4.811	
zuurstof	1.606E-05		0		0		0		0.0683	
argon	1.911E-05		0		0		0		0.0807	
kooldioxide	0.0003		0.0002		0		0		0.0034	
<b>TOTAAL :</b>	0.1297	70.7881	4.7205	-1062.41	2.5007	-2878.78	1.5005	-1727.27	5.4632	3176.09

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
water	0.0316		1.4758		1.9315		0.0014		2.3643	
aceetaldehyde	0.0002		0.0007		0.0025		5.2603		0	
ethyleen	0.0001		0		2.53E-09		2.138E-06		0	
ethaan	5.564E-05		3.98E-06		1.014E-09		0.0007		0	
azijnzuur	0		0.0227		0.0273		1.06E-16		0.0351	
ethylchloride	5.707E-05		0		3.837E-07		0		0	
chloroacetaldehyde	0		0.0005		0.0059		0.0006		6.586E-06	
waterstofchloride	3.793E-07		0.0008		0.0009		9.001E-13		1.808E-07	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	4.811		0		9.413E-06		0		0	
zuurstof	0.0683		0		2.165E-06		0		0	
argon	0.0807		0		2.315E-06		0		0	
kooldioxide	0.0034		0		1.936E-06		0.0003		0	
<b>TOTAAL :</b>	4.9954	3541.64	1.5005	-1725.79	1.9681	-2091.25	5.2632	2803.80	2.3994	-2049.38

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

Apparaatstroom Componenten	46		47		48		49		50	
	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q	M	Q
water	0.0004		0.0281		0.0014		0.0014		0.001	
aceetaldehyde	1.5407		1.719E-08		5.2603		5.2603		3.7196	
ethyleen	6.262E-07		0		0.0000		0.0000		1.512E-06	
ethaan	0.0002		0		0.0007		0.0007		0.0005	
azijnzuur	0		0.0035		0		0		0	
ethylchloride	0		0		0		0		0	
chloroacetaldehyde	0.0002		0.0694		0.0006		0.0006		0.0004	
waterstofchloride	0		0		0		0		0	
palladiumchloride	0		0		0		0		0	
cupro(I)chloride	0		0		0		0		0	
cupri(II)chloride	0		0		0		0		0	
stikstof	0		0		0		0		0	
zuurstof	0		0		0		0		0	
argon	0		0		0		0		0	
kooldioxide	0.0001		0		0.0003		0.0003		0.0002	
<b>TOTAAL :</b>	1.5415	-128.499	0.1010	67.6772	5.2632	-438.699	5.2632	-438.699	3.7217	-310.2

M in kg / s

Q in kW

Stroom / Componenten staat

## **7. OVERZICHT SPECIFIKATIE APPARATUUR**

De specificaties van de reactoren (R1 en R6) staat op pagina 32. Op pagina 33 t/m 37 staan de specificatiebladen van de destillatietorens (T12, T18 en T22) en de absorbers (T17 en T21). De specificatiebladen van de warmtewisselaars (H3A, H5, H7 H16 en H20), condensors (H10, H11 en H24) en reboiler (H19) staan op de pagina's 38 t/m 46. Op bladzijde 47 staan de specificaties van de vaten (V13, V14 en V15), accumulatoren (V25) en flash-torens (V4 en V9). De specificaties van de pompen (P8 en P23) en compressoren C2 en C3 staan op pagina 48.

## Reactorenspecificaties

	R1	R6
functie	alkeenoxidatiereactor	reoxidatiereactor
type	buisreactor gas / vloeistof	buisreactor gas / vloeistof
druk [ atm ]	11	12
temperatuur [ °C ]	110	115
volumestroom, in [ m <sup>3</sup> /h ]	945 (L) / 925 (V)	1066 (L) / 2437 (V)
diameter buis [ m ]	0.10	0.10
lengte buis [ m ]	30	30
aantal buizen	1325	2500
totaal doorstromend oppervlak [ m <sup>2</sup> ]	10.41	19.63
totale inhoud [ m <sup>3</sup> ]	312	589
katalysator		
type vorm	Palladiumchloride opgelost	- -
materiaal	titaniumlined RVS 316	titaniumlined RVS 316





## TORENSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer : <b>T 17</b>	Fabrieknummer :			
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>				
Functie : Type toren : Type schotel : Aantal schotels : Aantal schotels : Schotelafstand / HETS : Diameter toren : Materiaal toren : Verwarming :	Lage druk waterstofchloride / gechloreerd bijproduct-adsorptiekol gepakt -- theoretisch : n.v.t praktisch : 7 0.6 [ m ] 0.2 [ m ] RVS 304 geen Materiaal schotel : n.v.t Hoogte toren : 5.5 [ m ]			
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>				
	Voeding	Top	Bodem	Absorptie middel
Temperatuur [ °C ] Druk [ atm ] Dichtheid [ kg / m <sup>3</sup> ] Massastroom [ kg/s ]	4.99 1.5 2.213 0.0251	39.99 1.5 1.325 0.0166	40.75 1.5 972.45 1.0089	40 1.5 1.0029 975.57
Samenstelling in mol % resp. gew. %  Water Aceetaldehyde Ethyleen Ethaan Chlooraceetaldehyde Ethylchloride Waterstofchloride Azijnzuur Stikstof Zuurstof Argon Kooldioxide	0.446 / 0.241 26.96 / 35.60 13.41 / 11.28 4.74 / 4.27 0.019 / 0.044 0.859 / 1.66 0.0 / 0.0 0.002 / 0.003 45.42 / 38.14 4.25 / 4.08 3.82 / 4.58 0.084 / 0.110	4.60 / 2.86 0.007 / 0.011 17.64 / 17.11 6.24 / 6.49 0.0 / 0.0 1.06 / 2.37 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 59.73 / 57.86 5.59 / 6.19 5.02 / 6.94 0.108 / 0.165	99.12 / 97.48 0.387 / 0.931 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.008 / 0.034 0.001 / 0.002 0.026 / 0.052 0.457 / 1.497 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0	99.49 / 98.36 0.019 / 0.045 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.008 / 0.033 0.0 / 0.0 0.026 / 0.052 0.458 / 1.509 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0 0.0 / 0.0
<b>ONTWERP :</b>				
Aantal zeefgaten : Aktief schoteloppervlak Lengte overlooprand : Oppervlak voor valpijpe	-- -- -- --	[ m <sup>2</sup> ] [ m ] [ m <sup>2</sup> ]	Type pakking : Materiaal pakking : Afmetingen pakking :	Raschig Keramiek 50 [ mm ] (ringen)

## TORENSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer : T 18	Fabrieknummer :			
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>				
Functie : afdestillatie van de light-ends van het product Type toren : schotelkolom Type schotel : zeefplaat Aantal schotels : theoretisch : n.v.t. Aantal schotels : praktisch : 14 (excl. reboiler) Schotelafstand / HETS : 0.61 [ m ] Diameter toren : boven: 0.35 [ m ] / onder: 0.65 [ m ] Materiaal toren : RVS 304      Materiaal schotel : RVS 405 Verwarming : reboiler      Hoogte toren..... : 8.5 [ m ]				
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>				
	Voeding	Top	Bodem	Reflux
Temperatuur [ °C ]	4.99	2.66	54.82	--
Druk [ atm ]	1.5	1.5	1.5	--
Dichtheid [ kg/m <sup>3</sup> ]	820.44	2.563	783.04	--
Massastroom [ kg/s ]	4.850	0.130	4.720	--
Samenstelling in mol % resp. gew. %				
Water	35.64 / 18.3	0.49 / 0.23	36.53 / 18.8	
Acetaldehyde	60.80 / 76.6	0.10 / 0.11	62.33 / 78.8	
Ethyleen	1.21 / 0.97	48.92 / 36.1	0.0 / 0.0	
Ethaan	0.61 / 0.53	24.43 / 19.3	0.01 / 0.01	
Chlooracetaldehyde	0.64 / 1.44	0.0 / 0.0	0.66 / 1.48	
Ethylchloride	0.64 / 1.17	25.79 / 43.8	0.0 / 0.0	
Waterstofchloride	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	
Azijnzuur	0.46 / 0.80	0.0 / 0.0	0.48 / 0.82	
Stikstof	0.0 / 0.0	0.08 / 0.06	0.0 / 0.0	
Zuurstof	0.0 / 0.0	0.02 / 0.01	0.0 / 0.0	
Argon	0.0 / 0.0	0.01 / 0.01	0.0 / 0.0	
Kooldioxide	0.0 / 0.01	0.18 / 0.20	0.0 / 0.0	
<b>ONTWERP :</b>				
Aantal zeefgaten :	boven:	onder:		
Aktief schoteloppervlak :	0.095 [ m <sup>2</sup> ]	0.315 [ m <sup>2</sup> ]		
Lengte overlooprand :	0.095 [ m ]	0.315 [ m ]		
Oppervlak voor valpijpen :	4.231E-04 [ m <sup>2</sup> ]	0.009 [ m <sup>2</sup> ]		

## TORENSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer : <b>T 21</b>	Fabrieknummer :			
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>				
Functie : Hoge druk waterstofchloride / gechloreerd bijproduct-adsorptiekolom Type toren : gepakt Type schotel : -- Aantal schotels : theoretisch : n.v.t Aantal schotels : praktisch : 5 Schotelafstand / HETS : 1.03 [ m ]      Materiaal schotel : n.v.t. Diameter toren : 1.0 [ m ]      Hoogte toren : 6.5 [ m ] Materiaal toren : RVS 304 Verwarming : geen				
<b>BEDRIJFSCONDITIONS :</b>				
	Voeding	Top	Bodem	Absorptie middel
Temperatuur [ °C ]	60.00	48.77	60.83	40.24
Druk [ atm ]	11.0	11.0	11.0	11.0
Dichtheid [ kg / m <sup>3</sup> ]	956.62 / 11.270	11.694	956.04	975.45
Massastroom [ kg/s ]	0.431 / 5.032	4.995	1.968	1.500
Samenstelling in mol % resp. gew. %				
Water	13.31 / 8.92	0.986 / 0.632	99.43 / 98.14	99.49 / 98.36
Acetaldehyde	0.023 / 0.038	0.003 / 0.005	0.053 / 0.129	0.019 / 0.045
Ethyleen	0.002 / 0.002	0.002 / 0.002	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Ethaan	0.001 / 0.001	0.001 / 0.001	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Chlooracetaldehyde	0.034 / 0.099	0.0 / 0.0	0.070 / 0.300	0.008 / 0.033
Ethylchloride	0.0 / 0.001	0.0 / 0.001	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Waterstofchloride	0.002 / 0.002	0.0 / 0.0	0.023 / 0.047	0.026 / 0.052
Azijnzuur	0.038 / 0.086	0.0 / 0.0	0.422 / 1.389	0.458 / 1.51
Stikstof	84.51 / 88.06	96.63 / 96.31	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Zuurstof	1.05 / 1.25	1.20 / 1.37	0.001 / 0.00	0.0 / 0.0
Argon	0.994 / 1.48	1.14 / 1.62	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Kooldioxide	0.038 / 0.063	0.044 / 0.068	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
<b>ONTWERP :</b>				
Aantal zeefgaten :	--		Type pakking :	Raschig
Aktief schoteloppervlak :	--	[ m <sup>2</sup> ]	Materiaal pakking :	Keramiek
Lengte overlooprand :	--	[ m ]	Afmetingen pakking :	50 [ mm ]
Oppervlak voor valpijpen :	--	[ m <sup>2</sup> ]		(ringen)

## TORENSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	T 22	Fabrieknummer :			
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>					
Functie :	afdestillatie van acetaldehyde				
Type toren :	schotelkolom				
Type schotel :	zeefplaat				
Aantal schotels :	theoretisch :	n.v.t.			
Aantal schotels :	praktisch :	34 (excl. total condensor)			
Schotelafstand / HETS :	0.61 [ m ]				
Diameter toren :	1.6 [	Hoogte toren..... :	20.75 [ m ]		
Materiaal toren :	RVS 304	Materiaal schotel :	RVS 405		
Verwarming :	open stoom	( 1.5 kg/s)			
<b>BEDRIJFSCONDITIONS :</b>					
	Voeding	Top	Bodem	Side cut	Reflux
Temperatuur [ °C ]	54.82	31.9	111.7	99.8	29.60
Druk [ atm ]	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
Dichtheid [ kg/m <sup>3</sup> ]	783.04	2.729	905.85	2.02	765.9
Massastroom [ kg/s ]	4.720	5.269	2.40	0.101	1.547
Samenstelling in mol % resp. gew. %					
Water	36.53 / 18.89	0.06 / 0.03	99.56 / 98.53	62.33 / 27.82	0.06 / 0.03
Acetaldehyde	62.33 / 78.80	99.91 / 99.95	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	99.91 / 99.95
Ethyleen	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Ethaan	0.01 / 0.01	0.02 / 0.01	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.02 / 0.01
Chlooracetaldehyde	0.66 / 1.48	0.01 / 0.01	0.0 / 0.0	35.34 / 68.71	0.01 / 0.01
Ethylchloride	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Waterstofchloride	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Azijnzuur	0.48 / 0.82	0.0 / 0.0	0.44 / 1.47	2.33 / 3.47	0.0 / 0.0
Stikstof	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Zuurstof	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Argon	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
Kooldioxide	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
<b>ONTWERP :</b>					
Aantal zeefgaten :	boven:		onder:		
Aktief schoteloppervlak :	1.335	[ m <sup>2</sup> ]	1.335	[ m <sup>2</sup> ]	
Lengte overlooprand :	1.336	[ m ]	1.336	[ m ]	
Oppervlak voor valpijpen :	0.338	[ m <sup>2</sup> ]	0.338	[ m <sup>2</sup> ]	

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	<b>H 3A</b>	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Koeler tussen de twee compressiestappen van compressor C3	
Type :	Koeler	
Uitvoering :	met vaste pijplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	807.2 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	192 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	150 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	43 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	4	-
Aantal passages mantelzijde :	2	-
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.8	-
Gekorrigeerde LMTD :	34.4 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	gasstroom	koelwater
Massastroom : [ kg/s ]	6.39	11.34
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	n.v.t.	n.v.t.
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	-	4200.0
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	n.v.t.
Temperatuur IN : [ °C ]	152	20
Temperatuur UIT : [ °C ]	25	37
Druk : [ atm ]	3.46	3
Materiaal :	RVS 304	RVS 304

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	H 5	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Koelen van de katalysatoroplossing voor gas / vloeistofscheider V 4	
Type :	Koeler	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	4874.65 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	59 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	1023 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	84.0 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	2	-
Aantal passages mantelzijde :	1	-
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.98	-
Gekorrigeerde LMTD :	82.4 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	koelwater	katalysatoroplossing
Massastroom :	68.27	301.04
Massastroom te condenseren :	n.v.t.	0.10
Gemiddelde soortelijke warmte :	4200	1117.8 (V) / 3578.9 (L)
Verdampingswarmte :	n.v.t.	n.v.t.
Temperatuur IN :	20.0	114.9
Temperatuur UIT :	37.0	110.5
Druk :	3	11
Materiaal :	RVS 316	titaniumlined - RVS 316

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer : H 7	Aantal : 1	
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Opwarmen van de katalysatoroplossing voor de reoxydatiereactor	
Type :	Warmtewisselaar	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	1599 [ kW ] (berekend)	
Warmtewisselend oppervlak :	336. [ m <sup>2</sup> ] (berekend)	
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	1100 [ W/m <sup>2</sup> °C ] (globaal)	
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	50.8 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	2 -	
Aantal passages mantelzijde :	1 -	
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.85 -	
Gekorrigeerde LMTD :	43.2 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	middendruk stoom	katalysatoroplossing
Massastroom : [ kg/s ]	7.01	301.04
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	7.01	0.31
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	2093	1078.2 (V) / 3594.5 (L)
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	2163000	-
Temperatuur IN : [ °C ]	190.0	100.5
Temperatuur UIT : [ °C ]	133.0	115.0
Druk : [ atm ]	3	12
Materiaal :	RVS 316	titaniumlined - RVS 316

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	<b>H 10</b>	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Het verder koelen van de crude-overhead	
Type :	Brine Condensor (ammonia)	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	verticaal	
Capaciteit :	2045.95 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	110 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	750 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) :	26.6 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	-	-
Aantal passages mantelzijde :	-	-
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	1	-
Gekorrigeerde LMTD :	26.6 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	afgasstroom	brine
Massastroom : [ kg/s ]	10.47	1.58
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	1.58	1.58
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	-	2060.6 (V) / 4559.8 (L)
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	1296000
Temperatuur IN : [ °C ]	36.5	-8.91
Temperatuur UIT : [ °C ]	5.0	-8.91
Druk : [ atm ]	1.5	3
Materiaal :	RVS 304	RVS 304



## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	H 11	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Eerste condensor, waar de gasstroom uit T 12 gekoeld en partieel gecondenseerd wordt.	
Type :	Condensor	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	9219.85 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	406.3 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	975 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	29.1 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	2	-
Aantal passages mantelzijde :	4	-
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.8	-
Gekorrigeerde LMTD :	23.3 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	afgasstroom	koelwater
Massastroom : [ kg/s ]	10.47	129.1
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	8.86	n.v.t.
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	-	4200.0
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	n.v.t.
Temperatuur IN : [ °C ]	83.9	20
Temperatuur UIT : [ °C ]	36.5	37
Druk : [ atm ]	1.5	3
Materiaal :	RVS 304	RVS 304

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	<b>H 16</b>	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	koelen van de waterstroom voordat deze de absorptiekolommen ingaat	
Type :	Koeler	
Uitvoering :	met vaste pijplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	744.9 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	17.6 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	1100 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	41.4 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	4 -	
Aantal passages mantelzijde :	2 -	
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.93 -	
Gekorrigeerde LMTD :	38.5 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	koelwater	absorptiewater
Massastroom : [ kg/s ]	10.43	2.501
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	n.v.t.	n.v.t.
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	4200.0	4209.6
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	n.v.t.	n.v.t.
Temperatuur IN : [ °C ]	20	111.43
Temperatuur UIT : [ °C ]	37	40
Druk : [ atm ]	3	1.5
Materiaal :	RVS 316	RVS 316

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	H 19	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Reboiler van de light ends verwijderingskolom T 18	
Type :	Verdamper	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	verticaal	
Capaciteit :	706. [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	10.1 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	895 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	- [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	1 -	
Aantal passages mantelzijde :	1 -	
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	- -	
Gekorrigeerde LMTD :	78.2 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum :	bodestroom kolom	middendruk stoom
Massastroom : [ kg/s ]	4.72	0.31
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	n.v.t.	0.31
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	-	2081
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	2164000
Temperatuur IN : [ °C ]	54.8	190
Temperatuur UIT : [ °C ]	54.8	133
Druk : [ atm ]	1.5	3
Materiaal :	RVS 316	RVS 316

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	H 20	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Gaskoeler voordat de afgasstroom gestript wordt in T 17	
Type :	Koeler	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	horizontaal	
Capaciteit :	1282.34 [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	25.9 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	1000 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	55.1 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	1	-
Aantal passages mantelzijde :	2	-
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.90	-
Gekorrigeerde LMTD :	49.6 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIONES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	afgasstroom	koelwater
Massastroom : [ kg/s ]	5.463	17.96
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	0.43	n.v.t.
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	1075.9 (V) / 4166.2 (L)	4200.0
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	n.v.t.
Temperatuur IN : [ °C ]	110.5	20
Temperatuur UIT : [ °C ]	60	37
Druk : [ atm ]	11	3
Materiaal :	RVS 316	staal

## WARMTEWISSELAARSPECIFICATIEBLAD

Apparaatnummer :	H 24	Aantal : 1
<b>ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :</b>		
Functie :	Condenseren van de produkt stroom acetaldehyde	
Type :	Condensor	
Uitvoering :	met vaste pijpplaten	
Positie :	verticaal	
Capaciteit :	3242, [ kW ]	(berekend)
Warmtewisselend oppervlak :	325 [ m <sup>2</sup> ]	(berekend)
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt :	500 [ W/m <sup>2</sup> °C ]	(globaal)
Logaritmisch temperatuurverschil ( LMTD ) :	20.5 [ °C ]	
Aantal passages pijpzijde :	2 -	
Aantal passages mantelzijde :	1 -	
Korrektiefactor LMTD ( min 0.75 ) :	0.99 -	
Gekorrigeerde LMTD :	20.3 [ °C ]	
<b>BEDRIJFSCONDITIES :</b>		
	<b>Mantelzijde</b>	<b>Pijpzijde</b>
Soort fluidum :	condensaat	brine water
Massastroom : [ kg/s ]	5.26	77.53
Massastroom te condenseren : [ kg/s ]	5.26	n.v.t.
Gemiddelde soortelijke warmte : [ J/kg °C ]	2507.5 (L)	4186
Verdampingswarmte : [ J/kg ]	-	n.v.t.
Temperatuur IN : [ °C ]	31.9	5
Temperatuur UIT : [ °C ]	29.6	15
Druk : [ atm ]	1.5	1
Materiaal :	RVS 304	RVS 304

**APPARATENLIJST VOOR FLASHDRUMS EN ACCUMULATOREN**

Apparaat No.	V 4	V 9	V 13
type	horizontale gas-vloeistofscheider	horizontale gas-vloeistofscheider	Opslagvat voor proceswater
Capaciteit [ kg/s ]	295.6 (L) / 5.471 (V)	294.1 (L) / 7.563 (V)	6.065 (L)
Dichtheid [ kg/m <sup>3</sup> ]	1033.6 (L) / 9.453 (V)	1005.6 (L) / 1.306 (V)	905.98 (L)
Temperatuur [ °C ]	110.5	100.8	111.4
Druk [ atm ]	11.0	1.5	1.5
Viscositeit [ cP ]	0.2624 (L)/ 0.0204 (V)	0.2815 (L)/ 0.0119 (V)	0.2485
Diameter D [ m ]	3.20	3.66	1.72
Lengte L [ m ]	11.75	10.97	5.16
Dikte t [ mm ]	13	10	8
Volume [ m <sup>3</sup> ]	94.50	115.41	12.05
Materiaal	RVS 316 bekleed met titanium (0.04 in.)	RVS 316 bekleed met titanium (0.04 in.)	RVS 304

Apparaat No.	V 14	V 15	V 25
type	horizontale gas-vloeistofscheider	Opslagvat voor crude acetaldehyde	horizontale accumulator
Capaciteit [ kg/s ]	10.45 (L) / 0.02513 (V)	4.850 (L)	5.263 (L)
Dichtheid [ kg/m <sup>3</sup> ]	905.98 (L) / 1.822 (V)	820.44 (L)	765.9 (L)
Viscositeit [ cP ]	0.2486 (L)/0.0116 (V)	0.4711	0.2023
Temperatuur [ °C ]	5.0	5.0	29.6
Druk [ atm ]	1.5	1.5	1.5
Diameter D [ m ]	1.22	1.65	1.8
Lengte L [ m ]	4.21	4.95	2
Dikte t [ mm ]	8	8	8
Volume [ m <sup>3</sup> ]	4.92	10.64	5.09
Materiaal	RVS 304	RVS 304	RVS 304

## POMPEN EN COMPRESSOREN

Apparaat No.	C 2	C 3	P 8	P 23
type	ethyleen-voeding	lucht-voeding	rondpompen van de katalysator	verpompen van waterstroom
te verpompen medium	Ethyleen/ethaan gas	Lucht	Waterige oplossing van zouten	Water
Capaciteit [ kg/s ]	2.5204	6.3916	294.647	1.500
Dichtheid [ kg/m <sup>3</sup> ]	4.7	7.1	1005.49	975.569
Zuig-/persdruk effectief [ atm ] [ atm ]	4.0 11.0	1.0 12.0	1.5 12.0	1.5 11.0
Temperatuur in / uit [ °C ] [ °C ]	25.0 112.2	25.0 138.8	100.7 101.1	40.0 40.2
Vermogen theor. / prakt. [ kW ] [ kW ]	240.574 320.765	1611.173 2148.23	— 415.725	— 1.481
Speciaal te gebruiken materiaal	gietstaal	gietstaal	met titanium bekleed RVS 316	RVS 316



## 8. ECONOMISCHE ASPECTEN VAN HET ONTWERP

Van het uitgewerkte ontwerp van de aceetaldehyde-fabriek is om de economische haalbaarheid te bepalen de rentabiliteit van het proces bepaald. Om dit te bepalen zijn de Return on Investment (ROI) en de Internal Rate of Return (IRR) berekend. Door middel van verschillende methoden zijn de investeringen, opbrengsten en kosten bepaald. De bedragen, die oorspronkelijk in Amerikaanse dollars gegeven waren, zijn hierbij gecorrigeerd met behulp van een dollarkoers, waarbij per dollar fl 1.80 gerekend is. Aceetaldehyde is een tussenproduct dus is er vanuit gegaan dat de fabriek een onderdeel van een petrochemisch complex uitmaakt.

### 8.1 Investerings

De totale investeringen voor een chemische fabriek kunnen worden onderverdeeld in vier verschillende groepen [*Montfoort, deel II, blz III.1*]:

- $I_B$ : De investeringen in de proceseenheden ('battery limits') inclusief engineering en construction overhead.
- $I_H$ : De investering in hulpparaatuur ('off site' investering) inclusief de indirecte kosten.
- $I_L$ : De investering in niet-tastbare zaken, zoals licenties, know-how, start-up kosten.
- $I_w$ : Het werkkapitaal, voorraden, cash, terreinen.

De vier verschillende investeringen leveren de totale investering. De som van  $I_B + I_H$  wordt vaak aangeduid met 'fixed-capital',  $I_F$ . Om de totale investeringen te berekenen worden via twee verschillende methoden  $I_B$  en/of  $I_H$  bepaald, waarna volgens een gegeven investeringsopbouw [*Montfoort, deel II, blz III.2*] de andere investeringen worden berekend:

$$I_B : I_H : I_L : I_w = 64 : 16 : 14 : 6 \quad (8.1)$$

Er zijn verschillende soorten methoden om een schatting van  $I_B$  en/of  $I_H$  te maken. De methoden verschillen sterk in nauwkeurigheid. Om tot de keuze van investeringsmethode te komen, dient altijd de nauwkeurigheid met betrekking tot het stadium van de ontwikkeling van het ontwerp beschouwd te worden. Voor dit fabrieksvoorontwerp is een schatting van de investeringen met één type van de **stapmethode** en met één van de **factormethode** gemaakt.

De stapmethode is gebaseerd op het feit, dat investeringen een functie van de procescapaciteit en -complexiteit zijn en de basis vormen voor de schatting van de investeringen.

De factormethode is gebaseerd op de niet opgestelde apparatuurkosten en hiermee wordt de schatting van de investeringen berekend.

### 8.1.1 Schatting van de investeringen met de stapmethode van Taylor

Gebleken is [Montfoort, deel II, blz III.25] dat de meest nauwkeurige stapmethode de methode van Taylor is. Voor deze methode is het proces opgedeeld in vier processtappen:

de reactiesectie, de scheidingssectie en de afgaszuiverings-sectie, zie figuur 8.1. Van elke sectie werd de zogenaamde 'costliness index' bepaald [Montfoort, deel II, blz III.20-21]. In deze index worden de investeringen gecorrigeerd met gewichtsfactoren voor doorzet (gerelativeerd aan de produkt-doorzet), druk, temperatuur en constructiemateriaal.

Hieruit volgt voor een 'costliness index' van het gehele proces, waar met de capaciteit P (in kT/jaar) en de index  $C_I$  uit EPE (Engineering & Process Economics) een schatting volgt voor de investeringen in de battery limits  $I_B$  (in \$) via:

$$I_B = 93 \cdot f \cdot P^{0.39} \cdot \frac{C_I}{300} \quad (8.2)$$

In bijlage C.1 is een tabel ondergebracht waar de berekening van de totale 'costliness index' is bepaald.

Hieruit volgt met een capaciteit van 100 kT/jaar en een  $C_I$  van 900 een investering in de battery limits:

$$I_B = \text{fl. } 127.852.000,-$$

Met behulp van formule 8.1 worden de andere investeringen gevonden:

$$I_H = \text{fl. } 31.963.000,-$$

$$I_L = \text{fl. } 27.968.000,-$$

$$I_W = \text{fl. } 11.986.000,-$$

Hiermee komt de totale investering berekend via stapmethode van Taylor op:

$$I_{\text{tot}} = \text{fl. } 199.769.000,-$$

Voor de eindschatting van de totale investering wordt er echter nog een post onvoorzien van 30% meegenomen, zodat de totale investering hoger uitvalt namelijk:

$$I_{\text{Totaal}} = \text{fl. } 259.677.000,-$$

### 8.1.2 Schatting van de investeringen met de factormethode van Miller

De schatting van de factormethode berust op het gegeven, dat voor investeringen de grootste post gevormd wordt door de materiële kosten en een groot deel hiervan wordt

weer door de apparatuurkosten gevormd [Montfoort, deel II, blz III.25-34]. De methode is gebaseerd op de methode van Lang, waarbij de kosten van de apparatuur geleverd aan de fabriek vermenigvuldigd worden met de 'Lang factor' om tot de schating voor de investeringen te komen.

Er is gekozen voor de methode van Miller aangezien deze een verfijning is van de Lang-methode. De methode gaat uit van het zogenaamde "four area concept". Dit houdt in dat de fabriek wordt verdeeld over vier sectoren:

- procesinstallatie (battery limits)
- hulpdiensten (gas, lucht, water, electriciteit, etc)
- opslag en verpompning
- overhead (labratorium, bureaudiensten, etc)

De "battery limit"-kosten worden uitgerekend met gemodificeerde, van de gemiddelde procesapparatuurkosten afhankelijke Lang-factoren. Vervolgens worden de investeringskosten voor de onder punt 2, 3 en 4 genoemde sectoren verkregen als gegeven percentages van de battery limit-kosten [Montfoort, deel II, blz III.28]. De basis van de gemodificeerde Lang-factoren is het feit, dat deze mede afhankelijk zijn van de afmetingen, het constructiemateriaal en de werkdruk. Miller geeft hiervoor een relatie tussen de Lang-factor en de gemiddelde apparatuurkosten (MPI). De gemiddelde apparatuurkosten zijn gedefinieerd als de totaalkosten van de procesapparatuur gedeeld door het aantal geïnstalleerde apparaten. De Langfactor neemt af bij oplopende gemiddelde apparatuurkosten. De 'miscellaneous unlisted items' (MUE) worden als een percentage van de MPI genomen, in de range van 10 - 20 %. De "battery limit"-kosten worden dan:

$$I_b = L \cdot (MPI + MPU) \quad (8.3)$$

waarin:

$$L : \text{Langfactor} = 3.05$$

In bijlage C.2 is de tabel met de kostprijzen van de apparatuur weergegeven.

$$MPI = \text{fl. } 12.343.800,-$$

$$MUE = \text{fl. } 2.468.800,-$$

De battery limit-kosten  $I_b$  zijn dan:

$$I_b = \text{fl. } 45.178.300,-$$

De investeringskosten voor storage en handling, utilities en services bedragen achtereenvolgens: 20%, 25% en 10% van de battery limits, dus wordt het "fixed-capital"  $I_F$ :

$$I_F = \text{fl. } 72.059.400,- (= I_B + I_H)$$

Aan de hand van formule 8.1 volgt voor  $I_L$  en  $I_W$ :

$$I_L = \text{fl. } 12.610.400,-$$

$$I_W = \text{fl. } 5.404.450,-$$

De totale investeringen berekend via de methode van Miller wordt dan:

$$I_{\text{Totaal}} = \text{fl. } 90.074.300,-$$

Als er ook rekening gehouden wordt met 30% onvoorziene uitgaven wordt de totale investering volgens Miller:

$$I_{\text{Totaal,cor}} = \text{fl. } 117.100.000,-$$

### **8.1.3 Vergelijking van de beide schattingsmethoden van de investeringen**

De stapmethode van Taylor komt op een totale investering van fl. 259.699.000,-, terwijl de factormethode op een bedrag van fl.117.100.000,- komt. Voor de vergelijking dienen er enkele opmerkingen gemaakt te worden over beide schattingsmethoden.

De stapmethode van Taylor is gebaseerd op een opsplitsing van het proces in grote secties, waar van elke sectie een costliness index wordt bepaald om zo de totale index te verkrijgen. Uit de tabel C.I in bijlage C.1 is duidelijk te zien dat meer dan de helft van de index uit de reactiesectie komt. Dit komt door de grote katalysatorstroom (doorzet score) en door het feit dat de gehele katalysatorcyclus uitgevoerd is met titaniumlining. De  $C_I$  index uit EPE is geëxtrapoleerd vanuit waarden van 1970 tot 1978 (In 1978 bedroeg  $C_I$  310 !). De formule 8.2 waaruit de battery limits  $I_B$  bepaald worden, stamt ook uit die tijd en dient wellicht aangepast te worden voor de huidige economische situatie. Al deze redenen leiden tot een zeer hoge schatting voor de totale investeringen via de stapmethode van Taylor.

De factormethode van Miller is meer gebaseerd op de kostprijs van de proces-apparaten, aangezien de materiële kosten de grootste post is. De kostprijzen zijn berekend met gegevens uit december 1992.

Er is gekozen voor de factormethode van Miller om de investeringen te schatten en te gebruiken in de verdere economische analyse. De investeringskosten bedragen dus: fl.117.100.000,-

## 8.2 Kosten

De totale kosten van een chemische fabriek zijn te splitsen in twee soorten, de fabricagekosten en de algemene kosten. Algemene kosten zijn kosten voor marketing, administratie en research en ontwikkeling. Fabricagekosten bestaan uit de directe en de indirecte produktiekosten. De indirecte kosten, 'plant overhead', zijn kosten zoals terrein, kantine, veiligheid, laboratorium etc. De directe fabricagekosten zijn weer opgebouwd uit drie groepen: de produktievolume afhankelijke (grondstoffen, hulpmiddelen), de semi-variabele (katalysator, onderhoud, loon) en de investerings-afhankelijke kosten (afschrijving, verzekering, licentie).

In de fase van het fabrieksontwerp, waarin het fabrieksvoorontwerp zich bevindt, is er niet voldoende informatie aanwezig om elke post afzonderlijk te bepalen. Het maken van een schatting van de totale kosten is op dit punt van het ontwerp voldoende.

Voor de schatting is gebruik gemaakt van het zogenaamde '**Beste model**', [Montfoort, deel II, blz II.17-20]. Dit model moet zoals de naam vermeldt, het beste model voorstellen tussen enkele bekende modellen, die de totale kosten  $K_T$  opbouwen uit:

- grondstof- en hulpstofkosten en kosten voor bedrijfsmiddelen  $K_p$
- arbeidskosten  $L$
- investeringen (exclusief rente en afschrijvingen)  $I$

Het '**Beste model**' bepaalt de totale kosten volgens onderstaande formule:

$$K_T = 1.13 \cdot K_p + 2.6 \cdot L + 0.13 \cdot I \quad (8.4)$$

### Grondstoffen en hulpmiddelen $K_p$

De kosten  $K_p$  worden bepaald aan de hand van de kostprijzen van de grondstoffen en hulpstoffen en de hulpmiddelen, zoals koelwater, electriciteit, etc. In tabel C.III in bijlage C.3 zijn deze waarden getabelleerd.

Hieruit volgt een waarde voor  $K_p$ :

$$K_p = \text{fl. } 76.319.500,- \text{ per jaar}$$

### Arbeidskosten $L$

De arbeidskosten  $L$  worden bepaald aan de hand van de Wessel-relatie [Montfoort, deel II, blz II.37-39]. Hierbij is uitgegaan van een produktiecapaciteit van 322 ton per dag en een continu proces bestaande uit vijf secties: alkeenoxidatiereactie-, reoxidatie-, scheidings-, afgaszuiverings- en opwerkingssectie.

De Wessel-relatie geeft het aantal manuren per ton produkt als een functie van de capaciteit per dag en het aantal secties:

$$\frac{\text{manuren}}{\text{ton produkt}} = k \frac{\text{aantal secties}}{(\text{capaciteit/dag})^{0.76}} \quad (8.5)$$

In de formule 8.5 is voor k de waarde 1.303 genomen voor een continu proces in 1992. Eén functieplaats komt overeen met 24 manuren. Uit de Wessel-relatie volgt, dat voor deze fabriek 1.09 functieplaatsen beschikbaar/nodig zijn. Per functieplaats zijn de loonkosten fl. 420.000,-. Aangezien het proces een tussenprodukt levert, zal deze geïntegreerd zijn en is één functieplaats voldoende. De loonkosten worden dan:

$$L = \text{fl. } 420.000,- \text{ per jaar}$$

### **Investerings I**

De totale investeringen zijn bepaald in paragraaf 8.1 en bedragen:

$$I = \text{fl. } 117.100.000,-$$

De totale kosten van de fabriek per jaar, exclusief rente en afschrijvingen, komen volgens het 'Beste model' op:

$$K_T = \text{fl. } 102.556.000,-$$

### **8.3 Inkomsten**

De inkomsten van de fabriek worden berekend aan de hand van de kostprijzen van de produkten en de bijbehorende produktcapaciteit. In tabel C.IV in bijlage C.4 is een overzicht weergegeven van de inkomsten.

De totale inkomsten per jaar F bedragen:

$$F = \text{fl. } 228.702.400,- \text{ per jaar}$$

Dit bedrag is inclusief de kostprijs van de hoge-druk stikstof. Als deze stroom niet wordt meegenomen in de inkomsten worden de inkomsten fl. 194.177.00,-. De stikstofverkoop is afhankelijk van de mogelijkheid tot directe afzet, omdat opslagkosten hiervan onevenredig hoog zijn.

## 8.4 Rentabiliteit

Aan de hand van de Return on Investment (ROI) en de Internal Rate of Return (IRR) kan de rentabiliteit van het ontwerp worden bepaald. De investeringen voor de fabriek worden lineair afgeschreven over een periode van tien jaar, waarbij de restwaarde van de apparatuur wordt verwaarloosd. Voor het rentepercentage wordt 8% aangehouden en de jaarlijkse afschrijvingen worden gebruikt om leningen af te lossen.

Voor de bepaling van de ROI is de winst bepaald als het verschil van de netto opbrengst en de afschrijvingen, rente en belastingen [*Montfoort, deel II, blz V.5-6*]. Er wordt gemiddeld in de tienjarige afschrijvingsperiode 55% van de totale investeringen aan rente betaald. De ROI wordt bepaald bij een fabrieksbelasting van 100 en van 90 %.

In bijlage C.5 zijn de bedragen weergegeven.

De ROI bij 100% fabrieksbelasting is nu:

$$\text{ROI} = 46,9 \%$$

en bij 90% belasting:

$$\text{ROI} = 41,5 \%$$

IRR wordt berekend aan de hand van de jaarlijkse 'cashflow'. Deze is het verschil tussen de netto opbrengst en de afschrijvingen, rente en belastingen [*Montfoort, deel II, blz V.9-11*]. De jaarlijkse afschrijvingen worden gebruikt om leningen af te lossen, waardoor de rentelasten per jaar zullen afnemen en de cashflow zal stijgen. Een overzicht van de cashflows is ondergebracht in bijlage C.6. De IRR wordt bepaald op:

$$\text{IRR} = 44,7 \%$$

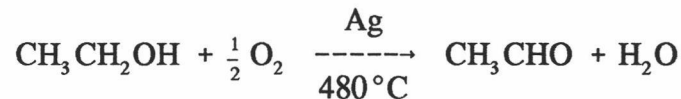


## 9. ALTERNATIEVE PROCESSEN

Enkele andere synthese-routes worden hieronder kort behandeld.

### Oxidatie van ethanol

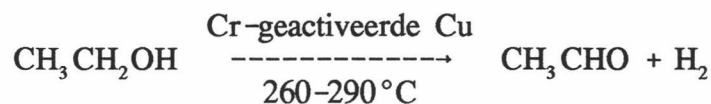
Aceetaldehyde wordt uit ethanol geproduceerd door katalytische oxidatie hiervan. Dit gebeurt door ethanol damp met lucht over een zilver katalysator te voeren bij 480°C. De optredende reactie is:



Met een buizenbundelreactie kan een conversie van 74-82 % per pass worden bereikt.

### Dehydrogenatie van ethanol

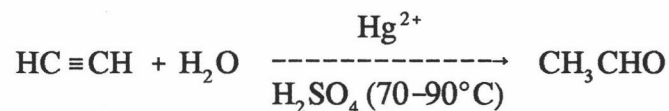
Voor de tweede wereldoorlog werd aceetaldehyde gemaakt door katalytische dehydrogenering van ethanol bij 260-290°C. De optredende reactie is:



De omzetting van ethanol naar aceetaldehyde is hier tussen de 30 en 50% per pass.

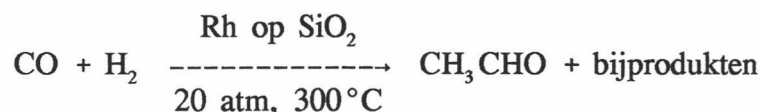
### Hydratatie van ethyn

Sinds 1916 wordt aceetaldehyde gemaakt door de hydratatie van ethyn. De proces is na 1960 bijna compleet vervangen door directe oxidatie van etheen. Ethyn van hoge zuiverheid wordt bij dit proces onder overdruk (103.4 kPa) door een verticale reactor gevoerd met een kwikbevattende katalysator. De reactie verloopt volgens:



### Directe synthese uit synthese gas

Aceetaldehyde kan direct uit synthese gas worden gesynthetiseerd volgens:



Hierbij wordt naast 24 % aceetaldehyde ook nog azijnzuur en ethanol geproduceerd (daarnaast kan het ook uit synthese gas en methanol verkregen worden maar dit proces is technisch niet haalbaar).

## 10. CONCLUSIE

De produktie van aceetaldehyde door middel van directe homogene oxidatie van etheen met behulp van lucht is technologisch en economisch rendabel. Toch dient er meer inzicht verkregen te worden in de reactiekinetiek van beide reactoren (in literatuur uit 1960-1970 is alleen data beschikbaar bij lage druk en temperatuur). Ook is de invloed van de concentratie ionen in de katalysatorstroom op de reactiesnelheid en op de oplosbaarheid van in het systeem aanwezige gassen niet duidelijk.

Alhoewel de produktie van aceetaldehyde op deze wijze economisch en technisch haalbaar is, is het milieu-technisch niet aan te raden. De overheid stelt tegenwoordig steeds strengere eisen aan het gebruik van toxische en voor het milieu schadelijke gechloreerde stoffen. Deze eisen zullen wellicht leiden tot extra kosten die in dit voorontwerp niet zijn meegenomen.

De positie van aceetaldehyde als grondstof voor de produktie van azijnzuur is sterk veranderd ten opzichte van de positie in de tijd dat dit proces werd ontwikkeld (1960). De produktie van azijnzuur wordt tegenwoordig via de carbonylering van methanol uitgevoerd zodat de vraag naar aceetaldehyde als grondstof sterk minder is geworden.

Er is in de economische beschouwing rekening gehouden met economisch voordeel door de benutting van de na de reoxidatie afgescheiden stikstofstroom. Aangezien de opslagkosten voor deze hoge-drukstroom (11 atm) aanzienlijk zijn dient de stikstof direct afgezet te worden. Als dit niet mogelijk is kan de energie inhoud van deze stroom via turbines teruggewonnen worden.

## 11. SYMBOLENLIJST

Symbol:	Omschrijving:	Eenheid:
a	aktiviteit	-
$a_v$	specifiek oppervlak pakking	$m^{-1}$
A	oppervlakte	$m^2$
b	constante	$m/m^2$
C	concentratie per kg of gmol	$kg/m^3$ , $gmol/m^3$
$C_p$	specifieke warmtecapaciteit bij constante druk per kg	$J/kg/^\circ C$
$C_p$	specifieke warmtecapaciteit bij constante druk per gmol	$J/gmol/^\circ C$
C	constante	-
$C_d$	dragcoëfficiënt	-
d	dikte	m
D	diameter	m
D	diffusiecoëfficiënt	$m^2/s$
$d_e$	equivalente diameter	m
$E_a$	aktiveringsenergie	J, N -m
F	inkomsten	fl/jaar
FA	vrij oppervlak	$m^2$
Fr	Froude getal	-
$F_p$	pakkingsfactor	$m^{-1}$
F(S,R)	correctiefactor voor stroming in warmtewisselaars	-
g,G	vrije enthalpie per kg, gmol	$J/kg$ , $J/gmol$
g	versnelling van de zwaartekracht	$m/s^2$
G	dampbelasting	mol/s
h	warmteoverdrachtscoëfficiënt	$W/m^2/^\circ C$
h, H	specifieke enthalpie per kg, gmol	$J/kg$ , $J/gmol$
h, H	hoogte	m
$h_L$	hold-up	-
$h_w$	hoogte overlooprand	m
H	Henry-coëfficiënt	-
$\Delta H_r$	reactie enthalpie	$J/gmol$
$\Delta H_f$	reactie enthalpie bij vorming uit de elementen	$J/gmol$
$\Delta H_{l,tot}$	totale hoogt valpijp	m

Symbol:	Omschrijving:	Eenheid:
a	aktiviteit	
$j_D$	stofoverdrachtsgetal	-
$j_f$	frictiefactor	-
$j_H$	warmteoverdrachtsfactor	-
k	stofoverdrachtscoëfficiënt	m/s
k	reactiesnelheidsconstante	-
K	evenwichtsconstante	-
$k_w$	thermische geleidingscoëfficiënt van het buismateriaal van warmtewisselaars	W/m/°C
$K_1$	constante afhankelijk van het aantal buispassages	-
l, L	lengte	m
$l_B$	baffleruimte	m
L	vloeistofbelasting	mol/s
m	massa	kg
m	reactieorde	-
m	constante, afhankelijk van $Re$	-
M	moleculaire massa	g/gmol
M	massastroom	kg/s
n	reactieorde	-
$n_1$	constante afhankelijk van het aantal buispassages	-
N	aantal (algemeen)	-
N	getal van Avogadro	-
$N_p$	aantal buispassages in een warmtewisselaar	-
$N_t$	aantal buizen in een warmtewisselaar	-
$N_r$	aantal buizen in verticale buisrij	-
p	partiaalspanning	N/m <sup>2</sup> (Pa), bar , atm
p	druk (absolute, totale)	N/m <sup>2</sup> (Pa), bar , atm
P	vermogen	W
Pr	getal van Prandtl	-
$p_t$	steek tussen de buizen in een warmtewisselaar	m
q	hoeveelheid per tijdseenheid	-
q	warmteinhoudscoëfficiënt bij destillatie	-
q	warmteproduktie per eenheid van volume	W/m <sup>3</sup>

Symbol:	Omschrijving:	Eenheid:
Q	hoeveelheid (algemeen)	-
Q	hoeveelheid warmte	J
Q	warmtestroom	J/s
r	verdampingswarmte	J/kg
r	straal	m
r	reactiesnelheid (stofproductie) per kg per volume-eenheid en per tijdseenheid	kg/m <sup>3</sup> /s
R	reactiesnelheid (stofproductie) per kmol per volume-eenheid en per tijdseenheid	kmol/m <sup>3</sup> /s
R	gasconstante	J/gmol/°C
R	vervuilingsfactor	W/m <sup>2</sup> /°C
R	warmtecapaciteitsverhouding	-
Re	getal van Reynolds	-
s	steek	m
s, S	entropie per kg, gmol	J/kg/°C, J/mol/°C
S	oppervlak van een doorsnede	m <sup>2</sup>
S	temperatuurefficiency	-
S	strippingfactor	-
Sc	getal van Schmidt	-
t	tijd, temperatuur in graden Celcius	s, °C
T	thermodynamische temperatuur	K
u	superficiële snelheid	m/s
u, U	inwendige energie per kg, mol	J/kg, J/mol
U	totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	W/m <sup>2</sup> /°C
U	snelheid	m/s
v	snelheid	m/s
V	volume	m <sup>3</sup>
V.O.	verwarmd oppervlak	m <sup>2</sup>
W	arbeid	J, N · m
W	lengte overlooprand	m
W	massastroom	kg/s

Grieks Symbool:	Omschrijving	Eenheid
$\alpha$	warmteoverdrachtscoëfficiënt	W/m <sup>2</sup> /°C
$\alpha_c$	constante	-
$\Delta$	verschil	-
$\Delta T_{\ln}$	gemiddeld logaritmisch temperatuursverschil	°C
$\Delta T$	gemiddeld temperatuur verschil	°C
$\zeta$	conversie	-
$\eta$	dynamische viscositeit	Pa -s, cP
$\lambda$	belastingsfactor	m/s
$\mu$	viscositeit (abs.)	Pa -s, cP
$\rho$	dichtheid	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	oppervlaktespanning	N/m
$\phi$	debiet, stroom	-
$\phi$	flowparameter	-
$\omega$	acentrische factor	-

Indices:	Omschrijving:	Indices:	Omschrijving:
b	bundel	max	maximaal
c	kritisch	min	minimaal
c	condensaat	o, od	buiten
cl	clearance	p	bij consatnte druk
d	valpijp, downcomer	p	passage
dr	droog	r	pakking
g	gasfase	s	superficiële
gem	gemiddeld	s	vaste stof
h	hulpstroom	s	spleet
h	gaatjes (holes)	t	buis
i	inwendig	tot	totaal
i	inlaat	u	uitwendig
i,j	voor componenten i,j	uit	uitlaat
i, id	binnen	v	gasfase
k	koud	v	volume
l	vloeistof	w	warmteoverdracht
m	medium	w	wand
mol	in molaire eenheden	w	overlooprاند
m	massa	x,y,z	in x-, y-, z-richting
m	mantel		



## 12. LITERATUUROVERZICHT

- Chemical Economics Handbook, SRI International, **1988**.
- Chemical Marketing Reporter, Schnell Publ. Company, **1993**.
- J.M. Coulson en J.F. Richardson, Chemical Engineering, Volume 6 An Introduction to Chemical Engineering Design, (Pergamon Press), **1983**, blz 511-621.
- DACE-WEBCI prijzenboekje, 16<sup>e</sup> editie, november **1992**.
- Dechema Chemistry Data Series, Dechema, Frankfurt **1979 e.v.**
- F.L. Evans, Equipment design handbook for refineries and chemical plants, 2nd Ed., 2, **1974**, blz. 153-165
- A.S. Jhaveri en M.M. Sharma, Chemical Engineering Science, 22, **1967**, blz. 1-6
- Kirk Othmer 3<sup>e</sup> Ed. 1, blz 97-112.
- Kirk Othmer 3<sup>e</sup> Ed. 5, blz 27-8.
- R. Krishna, Diktaat Scheidingsprocessen II, Department of Chemical Engineering, University of Amsterdam, **1991**.
- I. Mellan, Corrosion Resistant Materials Handbook, **1971**, blz 432.
- S.A. Miller (Ed.), Ethylene and its industrial derivatives, **1969**, blz 639-659.
- A.G. Montfoort, De Chemische Fabriek, IA, Flowsheettheorie en ontwerp, **1989**.
- A.G. Montfoort, De Chemische Fabriek, IB, **1989**.
- A.G. Montfoort, De Chemische Fabriek, II, Cost engineering en Economische aspecten, **1989**.
- I.I. Moiseev, Kinet. Katal. 11, No. 2, **1970**, blz 286-297.
- I.I. Moiseev en O.G. Levanda, Kinet. Katal. 12, No. 2, **1971**, blz 307-310.
- I.I. Moiseev en O.G. Levanda, Kinet. Katal. 12, No. 3, **1971**, blz 501-507.
- I.I. Moiseev, O.G. Levanda en M.N. Vargaftik, J.Chem.Am.Soc. , 96, **1974**, blz 1003-1007.

- Nederlandse emissie richtlijnen lucht, 1<sup>e</sup>Ed, mei **1992**, paragraaf 2.6.
- Patent NL-7603252
- Patent NL-7509689
- R.H. Perry, Perry's Chemical engineer's handbook, 6<sup>th</sup> Ed., New York, **1984**.
- VNCI, Chemiekaarten, gegevens voor veilig werken met chemicaliën, 5<sup>e</sup>Ed, **1989**.

## BIJLAGE A: Zuivere stofgegevens

Van de gebruikte stoffen staan op de pagina's A.2 t/m A.10 de zuivere stofgegevens, verkregen uit ChemCad 2.50. Enkele grootheden zijn gebruikt als functies van temperatuur en de functies staan hieronder genoemd met bijbehorende constanten.

\* warmtecapaciteit van ideaal gas:

$$C_{p,V} = C_{pA} + C_{pB} \cdot T + C_{pC} \cdot T^2 + C_{pD} \cdot T^3 + C_{pE} \cdot T^4 + C_{pF} \cdot T^5 \quad (1)$$

met  $C_{p,V}$  in cal/gmol/K en T in K.

\* warmtecapaciteit van vloeistof:

$$C_{p,L} = C_{pL,A} + C_{pL,B} \cdot T + C_{pL,C} \cdot T^2 + C_{pL,D} \cdot T^3 + C_{pL,E} \cdot T^4 \quad (2)$$

met  $C_{p,L}$  in J/kgmol/K en T in K.

\* verdampingswarmte:

$$\Delta H_{vap} = H_{vA} \cdot (1 - T_r)^{(H_{vB} + H_{vC} \cdot T_r + H_{vD} \cdot T_r)} \quad (3)$$

met  $\Delta H_{vap}$  in J/kgmol en  $T_r$  is de gereduceerde temperatuur.

\* vloeistofdichtheid:

$$\rho_L = \frac{DenA}{DenB^{1 + (1 + \frac{T}{DenC})^{DenD}}} \quad (4)$$

met  $\rho_L$  in kgmol/m<sup>3</sup> en T in K.

\* viscositeit:

$$\log(\mu_L) = VisA \cdot \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{VisB} \right) \quad (5)$$

met  $\mu_L$  in centpoise en T in K.

\* oppervlaktespanning:

$$\sigma = StnA \cdot (1 - T_r)^{STnB} \quad (6)$$

met  $\sigma$  in N/m en  $T_r$  is de gereduceerde temperatuur.

\* Antoine dampdrukvergelijking:

$$\ln(P_{sat}) = AntA - \frac{AntB}{T + AntC} \quad (7)$$

met  $P_{sat}$  als verzadigde dampdruk in mmHg en T in K.

## Naam component:

Molgewicht:	44.053	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	461	[K]
kritische druk, Pc:	54.8	[atm]
kritisch volume, Vc:	157	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	293.6	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	9.844	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	6150	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-39.76	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-31.86	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	5.8646	
- constante CpB:	0.018167	
- constante CpC:	3.2565E-05	
- constante CpD:	-4.7787E-08	
- constante CpE:	1.8154E-11	
- constante CpF:	0	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	0.3167	[-]
Dipoolmoment:	2.5	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	-	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	368.7	
- constante VisB:	192.82	

## Acetaldehyde

### Antoine:

- constante AntA:	17.135
- constante AntB:	2845.3
- constante AntC:	-22.067

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.06766
- constante STnB:	1.194

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	41700
- constante CpLB:	227
- constante CpLC:	0
- constante CpLD:	0
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	4.010E+07
- constante HvB:	0.369
- constante HvC:	0
- constante HvD:	0

### Dichtheid:

- constante DenA:	1.765
- constante DenB:	0.26738
- constante DenC:	461
- constante DenD:	0.28738

## Naam component:

Molgewicht:	28.054	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	282.41	[K]
kritische druk, Pc:	49.66	[atm]
kritisch volume, Vc:	129.07	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	169.4	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	6.08	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	3237	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	12.5	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	16.28	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	7.9326	
- constante CpB:	-0.013994	
- constante CpC:	0.0001162	
- constante CpD:	-1.6219E-07	
- constante CpE:	9.5278E-11	
- constante CpF:	-2.0686E-14	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	0.87	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	-	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	168.98	
- constante VisB:	93.94	

## Etheen

### Antoine:

- constante AntA:	15.833
- constante AntB:	1427.2
- constante AntC:	-14.308

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.05294
- constante STnB:	1.2784

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	247400
- constante CpLB:	-4428
- constante CpLC:	40.94
- constante CpLD:	-0.1697
- constante CpLE:	0.0002682

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	1.957E+07
- constante HvB:	0.686
- constante HvC:	-0.7266
- constante HvD:	0.439

### Dichtheid:

- constante DenA:	2.1433
- constante DenB:	0.28061
- constante DenC:	282.36
- constante DenD:	0.28571

## Naam component:

Molgewicht:	30.068	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	305.43	[K]
kritische druk, Pc:	48.2	[atm]
kritisch volume, Vc:	146.7	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	148.85	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	6.05	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, H <sub>vap</sub> :	3515	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, H <sub>form</sub> :	-20.04	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-7.87	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	1.292	
- constante CpB:	0.04254	
- constante CpC:	-1.657E-05	
- constante CpD:	2.081E-09	
- constante CpE:	0	
- constante CpF:	0	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	0.99	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	18.38	
API gravity:	265.5	
Specifieke gravity at 60°F :	0.356	
Rackett constante:	0.279	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	156.6	
- constante VisB:	95.57	

## Ethaan

### Antoine:

- constante AntA:	15.895
- constante AntB:	1582.2
- constante AntC:	-13.762

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.038194
- constante STnB:	0.9854

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	183100
- constante CpLB:	-3083
- constante CpLC:	29.61
- constante CpLD:	-0.1213
- constante CpLE:	0.0001843

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	2.090E+07
- constante HvB:	0.572
- constante HvC:	-5061
- constante HvD:	0.3133

### Dichtheid:

- constante DenA:	1.8257
- constante DenB:	0.2733
- constante DenC:	305.42
- constante DenD:	0.2833

## Naam component:

Molgewicht:	60.052	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	592.7	[K]
kritische druk, Pc:	57.1	[atm]
kritisch volume, Vc:	171	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	391.1	[K]
Oplosbaarheidsparemeter, delta:	10.051	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>

Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	5660	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-103.93	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-90.03	[kcal/mol]

### Warmtecapaciteit van ideaal gas :

- constante CpA:	7.7316
- constante CpB:	0.01038
- constante CpC:	9.0653E-05
- constante CpD:	-1.4534E-07
- constante CpE:	8.909E-11
- constante CpF:	-1.9734E-14

Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	0.4624	[-]
Dipoolmoment:	1.3	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	

Eps / K:	-
Watson factor:	-
API gravity:	-
Specifieke gravity at 60°F :	-
Rackett constante:	-

### Viscositeit:

- constante VisA:	600.94
- constante VisB:	306.21

## Azijnzuur

### Antoine:

- constante AntA:	17.882
- constante AntB:	4097.9
- constante AntC:	-27.494

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.05705
- constante STnB:	1.0703

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	50100
- constante CpLB:	245.6
- constante CpLC:	0
- constante CpLD:	0
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	1.260E+07
- constante HvB:	-1.11
- constante HvC:	0.063
- constante HvD:	1.142

### Dichtheid:

- constante DenA:	1.5791
- constante DenB:	0.2695
- constante DenC:	592.71
- constante DenD:	0.26843

## Naam component:

Molgewicht:	78.498	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	556	[K]
kritische druk, Pc:	53	[atm]
kritisch volume, Vc:	217	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	358.65	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	9.844	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	8127	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	61.34	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-31.86	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	7.1931	
- constante CpB:	0.032992	
- constante CpC:	-3.66E-06	
- constante CpD:	-5.567E-09	
- constante CpE:	0	
- constante CpF:	0	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	0.3092	[-]
Dipoolmoment:	1.99	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	-	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	368.7	
- constante VisB:	192.82	

## Chlooraceetaldehyde

### Antoine:

- constante AntA:	17.904
- constante AntB:	3756.7
- constante AntC:	-25

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.06766
- constante STnB:	1.194

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	69450
- constante CpLB:	227
- constante CpLC:	0
- constante CpLD:	0
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	5.035E+07
- constante HvB:	0.38
- constante HvC:	0
- constante HvD:	0

### Dichtheid:

- constante DenA:	1.765
- constante DenB:	0.26738
- constante DenC:	461
- constante DenD:	0.28738



## Naam component:

Molgewicht:	64.514 [mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	461.39 [K]
kritische druk, Pc:	52 [atm]
kritisch volume, Vc:	194.65 [cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	285.4 [K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	8.471 [cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	5900 [cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-26.7 [kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-14.34 [kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>	
- constante CpA:	2.2227
- constante CpB:	0.049799
- constante CpC:	-2.4078E-05
- constante CpD:	3.9844E-09
- constante CpE:	0
- constante CpF:	0
Moleculaire diameter:	4.45 [Å]
Acentrische factor :	0.19 [-]
Dipoolmoment:	2 [Debye]
Stiel polar factor:	0.005
Polar factor:	0.4
Eps / K:	423
Watson factor:	-
API gravity:	-
Specifieke gravity at 60°F :	-
Rackett constante:	-
<u>Viscositeit:</u>	
- constante VisA:	320.94
- constante VisB:	190.83

## Ethylchloride

### Antoine:

- constante AntA:	16.281
- constante AntB:	2458.2
- constante AntC:	-30.699

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.05141
- constante STnB:	0.992

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	80000
- constante CpLB:	535.9
- constante CpLC:	-5.18
- constante CpLD:	0.01896
- constante CpLE:	-2.246E-05

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	3.524E+07
- constante HvB:	0.3652
- constante HvC:	0
- constante HvD:	0

### Dichtheid:

- constante DenA:	1.3733
- constante DenB:	0.27464
- constante DenC:	460.35
- constante DenD:	0.2314

## Naam component:

Molgewicht:	18.02	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	647.35	[K]
kritische druk, Pc:	218.29	[atm]
kritisch volume, Vc:	63.494	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	373.15	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	23.4	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	9717	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-57.8	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-54.64	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	7.9755	
- constante CpB:	-0.00068835	
- constante CpC:	2.7806E-06	
- constante CpD:	1.9183E-09	
- constante CpE:	-3.0396E-12	
- constante CpF:	9.1595E-16	
Moleculaire diameter:	2.52	[Å]
Acentrische factor :	0.348	[-]
Dipoolmoment:	1.8	[Debye]
Stiel polar factor:	0.023	
Polar factor:	1	
Eps / K:	775	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	1	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	656.25	
- constante VisB:	283.16	

## Water

### Antoine:

- constante AntA:	18.304
- constante AntB:	3816.4
- constante AntC:	-46.13

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.1386
- constante STnB:	1.6866

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	52630
- constante CpLB:	241.2
- constante CpLC:	-0.8508
- constante CpLD:	0.001
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	5.761E+07
- constante HvB:	0.6964
- constante HvC:	-0.7797
- constante HvD:	0.4768

### Dichtheid:

- constante DenA:	4.6137
- constante DenB:	0.26214
- constante DenC:	647.29
- constante DenD:	0.23072

## Naam component:

Molgewicht:	36.461	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	324.65	[K]
kritische druk, Pc:	82	[atm]
kritisch volume, Vc:	81	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	188.1	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	7.011	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	3860	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-22.06	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-22.77	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	6.9309	
- constante CpB:	0.00085097	
- constante CpC:	-4.8868E-06	
- constante CpD:	1.006E-08	
- constante CpE:	-7.0815E-12	
- constante CpF:	1.6898E-15	
Moleculaire diameter:	3.36	[Å]
Acentrische factor :	0.1322	[-]
Dipoolmoment:	1.1	[Debye]
Stiel polar factor:	0.008	
Polar factor:	0.34	
Eps / K:	328	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	-	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	372.78	
- constante VisB:	277.74	

## Waterstofchloride

### Antoine:

- constante AntA:	16.723
- constante AntB:	1802.2
- constante AntC:	-9.668

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.0852
- constante STnB:	1.297

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	47300
- constante CpLB:	90
- constante CpLC:	0
- constante CpLD:	0
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	3.054E+08
- constante HvB:	1.69
- constante HvC:	-2.239
- constante HvD:	1.009

### Dichtheid:

- constante DenA:	3.03
- constante DenB:	0.26
- constante DenC:	324.65
- constante DenD:	0.306

## Naam component:

Molgewicht:	28.013	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	126.2	[K]
kritische druk, Pc:	33.49	[atm]
kritisch volume, Vc:	88.6	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	77.4	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	3.3	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	1333	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	0	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	0	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	7.44	
- constante CpB:	-0.00324	
- constante CpC:	6.4E-06	
- constante CpD:	-2.79E-09	
- constante CpE:	0	
- constante CpF:	0	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	-	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	6.415	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	0.808	
Rackett constante:	0.291	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	90.3	
- constante VisB:	46.14	

## Stikstof

### Antoine:

- constante AntA:	15.463
- constante AntB:	658.22
- constante AntC:	-2.854

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.02898
- constante STnB:	1.2457

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	-33400
- constante CpLB:	3507
- constante CpLC:	-46.7
- constante CpLD:	0.2127
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	9.430E+06
- constante HvB:	1.201
- constante HvC:	-1.481
- constante HvD:	0.7085

### Dichtheid:

- constante DenA:	3.625
- constante DenB:	0.3039
- constante DenC:	126.13
- constante DenD:	0.3162

## Naam component:

Molgewicht:	31.999	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	154.58	[K]
kritische druk, Pc:	50.1	[atm]
kritisch volume, Vc:	49.77	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	90.2	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	4	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	1630	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	0	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	0	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	6.995	
- constante CpB:	-0.0013354	
- constante CpC:	6.1854E-06	
- constante CpD:	-3.382E-09	
- constante CpE:	-8.1356E-13	
- constante CpF:	7.0823E-16	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	-	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	4.84	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	1.128	
Rackett constante:	0.291	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	85.68	
- constante VisB:	51.5	

## Zuurstof

### Antoine:

- constante AntA:	15.699
- constante AntB:	780.26
- constante AntC:	-4.176

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.038066
- constante STnB:	1.2136

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	68340
- constante CpLB:	-613.5
- constante CpLC:	7.928
- constante CpLD:	-0.03168
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	8.040E+06
- constante HvB:	-0.098
- constante HvC:	0.599
- constante HvD:	-0.189

### Dichtheid:

- constante DenA:	4.356
- constante DenB:	0.3025
- constante DenC:	154.58
- constante DenD:	0.3158

## Naam component:

Molgewicht:	39.948	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	150.86	[K]
kritische druk, Pc:	48.34	[atm]
kritisch volume, Vc:	74.59	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt, Tb:	87.28	[K]
Oplosbaarheidsparameter, delta:	6.912	[cal/cm <sup>3</sup> ] <sup>1/2</sup>
Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	1560	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	0	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	0	[kcal/mol]
<u>Warmtecapaciteit van ideaal gas :</u>		
- constante CpA:	4.9647	
- constante CpB:	0	
- constante CpC:	0	
- constante CpD:	0	
- constante CpE:	0	
- constante CpF:	0	
Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	-	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	
Eps / K:	-	
Watson factor:	-	
API gravity:	-	
Specifieke gravity at 60°F :	-	
Rackett constante:	-	
<u>Viscositeit:</u>		
- constante VisA:	107.57	
- constante VisB:	58.76	

## Argon

### Antoine:

- constante AntA:	15.93
- constante AntB:	832.78
- constante AntC:	2.361

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.03823
- constante STnB:	1.2927

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	182300
- constante CpLB:	-2827
- constante CpLC:	14.68
- constante CpLD:	0
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	8.729E+06
- constante HvB:	0.352
- constante HvC:	0
- constante HvD:	0

### Dichtheid:

- constante DenA:	3.803
- constante DenB:	0.286
- constante DenC:	150.86
- constante DenD:	0.2984

## Naam component:

Molgewicht:	44.01	[mol/g]
kritische temperatuur, Tc:	304.2	[K]
kritische druk, Pc:	72.85	[atm]
kritisch volume, Vc:	92.863	[cm <sup>3</sup> /mol]
kookpunt ,Tb:	194.7	[K]

Oplosbaarheidsparameter, delta: 6 [cal/cm<sup>3</sup>]<sup>1/2</sup>

Verdampingswarmte bij Tb, Hvap:	4100	[cal/mol]
Vormingsenthalpie bij 25°C, Hform:	-94.05	[kcal/mol]
Gibbsvormingsenthalpie bij 25°C:	-94.26	[kcal/mol]

### Warmtecapaciteit van ideaal gas :

- constante CpA:	6.8862
- constante CpB:	-0.0019776
- constante CpC:	4.7078E-05
- constante CpD:	-7.9135E-08
- constante CpE:	5.2566E-11
- constante CpF:	-1.2508E-14

Moleculaire diameter:	-	[Å]
Acentrische factor :	-	[-]
Dipoolmoment:	-	[Debye]
Stiel polar factor:	-	
Polar factor:	-	

Eps / K:	-
Watson factor:	-
API gravity:	-
Specifieke gravity at 60°F :	0.827
Rackett constante:	0.275

### Viscositeit:

- constante VisA:	578.08
- constante VisB:	185.24

## Kooldioxide

### Antoine:

- constante AntA:	22.59
- constante AntB:	3103.4
- constante AntC:	-0.16

### Oppervlaktespanning:

- constante STnA:	0.07997
- constante STnB:	1.2617

### Warmtecapaciteit van vloeistof:

- constante CpLA:	-8304000
- constante CpLB:	104400
- constante CpLC:	-433.3
- constante CpLD:	0.6005
- constante CpLE:	0

### Verdampingswarmte:

- constante HvA:	1.826E+07
- constante HvB:	0.2146
- constante HvC:	-0.659
- constante HvD:	0.7826

### Dichtheid:

- constante DenA:	2.4251
- constante DenB:	0.24879
- constante DenC:	304.2
- constante DenD:	0.25834

## **Bijlage B: Dimensionering apparaten**

bijlage B.1: de reactoren

bijlage B.2: de destillatiekolommen

bijlage B.3: de absorptiekolommen

bijlage B.4: de warmtewisselaars

bijlage B.5: de accumulatoren en scheidingsvaten



## B1: Reactoren.

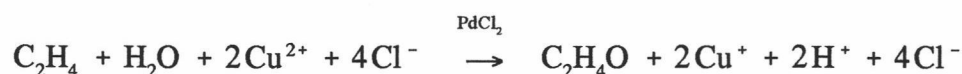
Bij het ontwerp van de gas/vloeistof-reactoren moet er onder andere rekening worden gehouden met de volgende voorwaarden en aannamen:

- de verblijftijd in de reactor moet voldoende zijn om de gewenste conversie te bewerkstelligen.
- het vloeistof/gas contact moet goed zijn, zodat dit niet een beperkende factor wordt voor de reactie.
- er wordt aangenomen, dat het gas bij de heersende druk en temperatuur goed oplost in de katalysator-oplossing en onmiddellijk wegreacteert.

In het hele proces zijn twee gas/vloeistof-reactoren aanwezig: de alkeenoxidatiereactor R1 en de reoxidatiereactor R6. Beide worden hieronder behandeld.

### De alkeenoxidatiereactor R1

De overallreactie in deze reactor is:



Hierdoor wordt de reactiesnelheidsvergelijking [Henry, 1964, 1966, 1968; Moiseev, 1970, 1971, 1974]:

$$-\frac{d[\text{C}_2\text{H}_4]}{dt} = \frac{k_1 K_1 K_2 K_3 [\text{PdCl}_4^{2-}][\text{C}_2\text{H}_4]}{[\text{Cl}^-]^2 [\text{H}_3\text{O}^+]} \quad (4.1)$$

Hierin is: bij 25°C en 1 atm [Henry, 1966]:

$$k_1 \cdot K_1 \cdot K_2 \cdot K_3 = k' \cdot K_1 = 20.3 \cdot 10^5 \cdot 17.4 \text{ mol}^2/\text{l}^2\text{s} = 3,5322 \cdot 10^7 \text{ mol}^2/\text{l}^2\text{s}$$

Er is echter in de literatuur verder geen data bij de heersende reactietemperatuur en -druk (110°C, 11 atm) gevonden om deze vergelijking aan te fitten. Het is dus niet goed mogelijk de reactor via deze kinetische route te dimensioneren.

Daarom is gekozen voor een andere aanpak:

De reactor wordt op basis van voldoende verblijftijd gedimensioneerd. Er is gekozen voor een verblijftijd van 10 minuten, waarin het etheen de gelegenheid krijgt op te lossen in de katalysator-oplossing en voor zo'n 98% weg te reageren tot acetaldehyde en bijprodukten.

Vanwege de grootte van de volumestroom van de katalysator/etheen-stroom is gekozen voor een aantal parallelle buisreactoren met een diameter van 0.1 m.

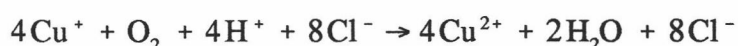
Dit heeft een aantal voordelen:

- de reactie is op deze wijze beter in de hand te houden in tegenstelling tot één grote buisreactor.
- het contact tussen de gas- en vloeistoffase is beter, vanwege de stromingsprofielen, die in de afzonderlijke buizen voorkomen.
- het proces wordt flexibeler op fluctuaties in de voedingsstroom.
- reparaties/vervangen zijn sneller en eenvoudiger uit te voeren.

Aan de hand van de superficiële snelheid van de stroom en de verblijftijd wordt de lengte van de reactor bepaald. Aangenomen wordt dat de superficiële snelheid voor beide fasen 0.05 m/s bedraagt. Hiervoor is een reactorlengte nodig van 30 m. Aan de hand van de totale volumestroom en deze lengte volgt een oppervlak van 10.41 m<sup>2</sup>. Dit houdt in, dat er 1325 buizen nodig zijn. Het totale reactorvolume bedraagt nu 312 m<sup>3</sup>.

### De reoxidatiereactor R6

De overallreactie, die plaats vindt in deze gas/vloeistofreactor, is:



De reactiesnelheidsvergelijking is volgens Jhaversi en Sharma [1966]:

$$-\frac{d(p\text{O}_2)}{dt} = k \cdot p\text{O}_2 \cdot [\text{CuCl}_2^-]^2 \quad (1)$$

Er is echter in de literatuur geen data bij de heersende reactietemperatuur en -druk (115°C, 12 atm) gevonden om deze vergelijking aan te fitten ! Het is dus weer niet mogelijk de reactor via de kinetische route te dimensioneren.

Daarom is gekozen voor dezelfde aanpak als voor R1:

De reactor wordt op basis van voldoende verblijftijd gedimensioneerd. Er is gekozen voor een verblijftijd van 10 minuten, waarin de zuurstof de gelegenheid krijgt op te lossen in de katalysator-oplossing en voor zo'n 95% weg te reageren.

Er is net als bij R1 gekozen voor een aantal parallelle buisreactoren met een diameter van 0.1 m, vanwege de grootte van de gas/vloeistofstroom.

Aan de hand van de superficiële snelheid van de stroom en de verblijftijd wordt de lengte van de reactor bepaald. Aangenomen wordt dat de superficiële snelheid voor beide fasen 0.05 m/s bedraagt. Hiervoor is een reactorlengte nodig van 30 m. Aan de hand van de totale volumestroom en deze lengte volgt een oppervlak van 19.63 m<sup>2</sup>. Dit houdt in, dat er 2500 buizen nodig zijn. Het totale reactorvolume bedraagt nu 589 m<sup>3</sup>.

## B2: Destillatiekolommen.

Voor het dimensioneren van de destillatiekolommen is gebruik gemaakt van de methode beschreven in het diktaat van Krishna [Krishna, 1991].

Gekozen is voor zeefschotel-kolommen, omdat deze een hoog rendement en een relatief laag drukverlies hebben en bovendien goedkoop in uitvoering zijn. De kolommen zijn gedimensioneerd op een topschotel en op een bodemschotel (geprobeerd is voor elke kolom uiteindelijk één ontwerp aan te houden, maar vanwege ongelijke verdeling van de stromen in de kolom kan hier niet altijd aan worden voldaan.)

Aan de hand van de capaciteitscurven in de figuren 8, 9 en 10 [Krishna, 1991] kan de maximale belastingsfactor  $\lambda_{\max}$ , waarbij nog net geen flooding optreedt, bepaald worden met behulp van een gekozen schotel-afstand  $H_s$  en een berekende waarde van de flowparameter  $\phi$ :

$$\phi = \frac{M_L}{M_V} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} \quad (1)$$

$\phi$	: flowparameter	[-]
$M_L$	: massastroom vloeistof	[kg/s]
$M_V$	: massastroom gas	[kg/s]
$\rho_L$	: dichtheid vloeistof	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_V$	: dichtheid gas	[kg/m <sup>3</sup> ]

Bovenstaande gegevens zijn via de option tray properties van het computerprogramma ChemCad versie 2.50 bepaald. Als ontwerpcriterium wordt voor de werkelijke belastingsfactor 80% van de maximale genomen. De superficiële gassnelheid wordt berekend via:

$$U_{g,s} = 0.8 \lambda_{s,\max} \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g}} \quad (2)$$

$U_{g,s}$	: superficiële gassnelheid	[m/s]
$\lambda_{s,\max}$	: maximale belastingsfactor	[m/s]

Op basis van deze gassnelheid en het gasvolumedebiet kan nu het oppervlak van de schotel bepaald worden:

$$A_{tot} = \frac{\Phi_{v,g}}{U_{g,s}} \quad (3)$$

$\Phi_{v,g}$  : volumedebiet gas [m<sup>3</sup>/s]

$A_{tot}$  : totale oppervlak van de schotel [m<sup>2</sup>]

De diameter van de kolom wordt dan:

$$D = \sqrt{\frac{4 * A_{tot}}{\pi}} \quad [m] \quad (4)$$

Via een iteratief proces wordt de lengte van de overlooprand, W gekozen en via goniometrische formules volgt dan het oppervlak bestemd voor de bovenkanten van de valpijpen,  $A_d$  en het actieve oppervlak,  $A_b$ . Tevens wordt een waarde voor de constante b bepaald:

$$A_b = A_{kolom} - 2 * A_d \quad \text{en} \quad b = \frac{W}{A_b} \quad (5)$$

$A_b$  : het actieve oppervlak [m<sup>2</sup>]

$A_{kolom}$  : het totale oppervlak van de kolom [m<sup>2</sup>]

$A_d$  : het oppervlak voor de valpijpen [m<sup>2</sup>]

W : de lengte van de overlooprand [m]

b : constante [m/m<sup>2</sup>]

Het percentage van het totale oppervlak voor de bovenkanten van de valpijpen ( $A_d/A_{tot}$ ) moet groter zijn dan 5 % om te zorgen dat er geen flooding optreedt. De constante b moet een waarde hebben van 0.5 tot 1 (als b groter wordt, is er meer oppervlak voor de bovenkanten van de valpijpen).

De gas- en vloeistofsnelheden worden nu berekend op basis van het actieve oppervlak:

$$U_g = \frac{\Phi_{vg}}{A_b} \quad U_l = \frac{\Phi_{vl}}{A_b} \quad (6)$$

$U_g$  : gassnelheid [m/s]

$U_l$  : vloeistofsnelheid [m/s]

$\Phi_{vl}$  : volumedebiet vloeistof [m<sup>3</sup>/s]

De gekozen kolomspecificaties  $D$  en  $H_s$  en schotel-specificaties  $b$ ,  $A_b$  en  $h_w$  moeten worden getoetst of ze niet de volgende grenzen overschrijden:

- flooding ten gevolge van het vollopen van de valpijpen.
- doorregenen van de schotel.

#### ad.1 Flooding ten gevolge van het vollopen van de valpijpen

De hoogte van de vloeistof in de valpijp moet lager zijn dan de som van de schotelafstand  $H_s$  en de hoogte van de overlooprand  $h_w$ .

Algemeen:

$$\Delta H_{l,tot} < \frac{1}{2}(H_s + h_w) \quad (7)$$

$\Delta H_{l,tot}$  : totale vloeistofhoogte valpijp [m]

De rechter term ligt vast (beide waarden zijn al gekozen) en de hoogte van de vloeistof in de valpijp wordt bepaald via een drukbalans rond de valpijp:

$$\Delta H_{l,tot} = \Delta H + h_{cl} + h_s \quad (8)$$

$\Delta H$  : drukverlies over de bovenliggende schotel [m]

$h_{cl}$  : heldere vloeistofhoogte [m]

$h_s$  : de benodigde vloeistofhoogte voor spleetstroming [m]

Bij de bepaling van de totale vloeistofhoogte wordt er van uitgegaan dat de kolom een universeel schotelontwerp heeft, zodat het drukverlies over de bovenliggende schotel dezelfde is als die van de te specificeren schotel.

Dit drukverlies wordt berekend via:

$$\Delta H = \frac{1}{2g} \left( \frac{\rho_g}{\rho_l} \right) \left( \frac{Ug}{FA C_d} \right)^2 + h_{cl} \quad \text{met} \quad FA = \frac{A_h}{A_b} \approx 0.1 \quad (9)$$

$C_d$  : coëfficiënt 0.67 [-]

$A_h$  : oppervlak van de zeefgaatjes [m<sup>2</sup>]

FA : fractie vrij oppervlak [-]

De heldere vloeistofhoogte wordt bepaald met de Bennet-correlatie:

$$h_{cl} = \alpha_e \left( h_w + C \left( \frac{\Phi_{v,l}}{W \alpha_e} \right)^{0.67} \right) \quad (10)$$

De waarden voor  $\alpha_e$  en C uit formule (10) worden als volgt berekend:

$$\alpha_e = \exp \left( -12.55 \left( U_g \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l - \rho_g}} \right)^{0.91} \right) \quad (10.a)$$

$$C = 0.5 + 0.438 \exp(-137.8 h_w)$$

De benodigde vloeistofhoogte om door de spleet te stromen kan berekend worden door:

$$h_s = \frac{1}{2g} \left( \frac{\Phi_{v,l}}{C_d W D_{cl}} \right)^2 \quad (11)$$

$C_d$  = constante 0.55 [-]

$D_{cl}$  = spleethoogte  $\approx$  25 [mm]

## ad.2: Doorregenen van de schotel

Als de gassnelheid door de zeefgaatjes te laag is, zal de vloeistof door deze gaatjes naar de ondergelegen schotel druppelen ('doorregenen'), waardoor de efficiëntie van de schotel omlaag gaat, aangezien de vloeistof dwars over het schoteloppervlak en via de valpijpen naar de ondergelegen schotel dient te stromen.

De gassnelheid in de zeefgaatjes is:

$$U_h = U_{gs} \frac{A_{tot}}{A_h} \quad (12)$$

$U_h$  : gassnelheid in de zeefgaatjes [m/s]

Met behulp van het Froude getal met betrekking op de zeefgaatjes kan worden bepaald of er sprake is van doorregenen (weeping):

$$Fr_h = U_h \sqrt{\frac{\rho_g}{g h_{cl} \rho_l}} \quad (13)$$

Indien  $Fr_h < 0.67$  is er sprake van weeping.

Het ontwerp wordt ook bij 70% turndown getest op weeping. Voor de superficiële gassnelheid wordt dan 70% van de oorspronkelijke gassnelheid genomen.

De bovenstaande methode is toegepast op drie destillatietorens T 12, T 18 en T 22, van elke kolom is een top- en een bodemschotel doorgerekend. De belangrijkste parameters voor het ontwerp staan getabelleerd in Tabel B2.1.



**Tabel B2.1 : De belangrijkste parameters voor het ontwerp van de zeefschotels van de destillatiekolommen.**

		Destillatietoren T 12		Destillatietoren T 18	
		Schotel no. 3	Schotel no. 7	Schotel no.8	Schotel no.14
Aantal schotels	[ - ]	3 ( top )	4 ( bodem )	12	2
Hs	[ m ]	0.61	0.61	0.61	0.61
hw	[ m ]	0.05	0.05	0.05	0.05
Zeefgat diameter	[ m ]	0.005	0.005	0.005	0.005
Massastroom vlst	[ kg/s ]	6.01	6.07	4.807	5.735
Massastroom gas	[ kg/s ]	7.76	0.405	0.084	0.619
Dichtheid vlst	[ kg/m <sup>3</sup> ]	911.5	906.5	818.6	777.9
Dichtheid gas	[ kg/m <sup>3</sup> ]	1.338	0.927	2.016	2.318
Lambda-max	[ - ]	0.1075	0.068	0.04	0.075
Ab	[ m <sup>2</sup> ]	3.11	0.458	0.095	0.315
Ug	[ m/s ]	1.864	0.955	0.438	0.848
U1	[ m/s ]	0.002	0.015	0.006	0.023
FreeA	[ - ]	0.1	0.04	0.025	0.08
D	[ m ]	2.2	0.8	0.35	0.65
hoogte H	[ m ]	2.0	2.6	7.9	1.3
Drukval	[ atm ]	0.022	0.043	0.18	0.014

		Destillatietoren T 22	
		Schotel no. 3	Schotel no. 33
Aantal schotels	[ - ]	28 ( top )	6 ( bodem )
Hs	[ m ]	0.61	0.61
hw	[ m ]	0.05	0.05
Zeefgat diameter	[ m ]	0.005	0.005
Massastroom vlst	[ kg/s ]	1.529	2.451
Massastroom gas	[ kg/s ]	5.268	1.588
Dichtheid vlst	[ kg/m <sup>3</sup> ]	765.3	907.4
Dichtheid gas	[ kg/m <sup>3</sup> ]	2.729	0.916
Lambda-max	[ - ]	0.11	0.1075
Ab	[ m <sup>2</sup> ]	1.335	1.335
Ug	[ m/s ]	1.446	1.299
U1	[ m/s ]	0.002	0.002
FreeA	[ - ]	0.1	0.07
D	[ m ]	1.6	1.6
hoogte H	[ m ]	18.5	4.0
Drukval	[ atm ]	0.224	0.036

### B3: Gepakte absorptiekolommen.

Voor het dimensioneren van gepakte absorptiekolommen is gebruik gemaakt van de methode beschreven in het diktaat van Krishna [Krishna, 1991].

Als pakking is gekozen voor keramische Raschig ringen van 50 mm in 'random' pakking. Bij deze pakking hoort een pakkingsfactor  $F_p$  van 215 [-]. Vanwege de aanwezigheid van waterstof-chloride is de pakking van keramisch materiaal vervaardigd.

Voor de flowparameter  $\phi$  geldt:

$$\phi = \frac{U_l}{U_g} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} = \frac{\Phi_{v,l}}{\Phi_{v,g}} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (1)$$

$U_l$	: vloeistofsnelheid	[m/s]
$U_g$	: gassnelheid	[m/s]
$\rho_l$	: dichtheid vloeistof	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_g$	: dichtheid gas	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\Phi_{v,l}$	: vloeistof-volumestroom	[m <sup>3</sup> /s]
$\Phi_{v,g}$	: gas-volumestroom	[m <sup>3</sup> /s]

Uit figuur 7 [Krishna, 1991, blz. 89] volgt nu met flowparameter  $\phi$  voor de maximale belastingsfactor  $\lambda_{\max}$ :

$$\lambda_{\max} = Y \left( \frac{F_p}{g} \right)^{-0.5} \left( \frac{\eta_l}{\eta_g} \right)^{-0.05} \quad (2)$$

$Y$	: y-asafsnode (fig 7)	[-]
$F_p$	: pakkingsfactor (= 215)	[m <sup>-1</sup> ]
$g$	: gravitatieversnelling	[m/s <sup>2</sup> ]
$\eta_l$	: viscositeit van de vloeistof	[cP]
$\eta_g$	: viscositeit van het gas	[cP]

De bovenstaande gegevens zijn met de optie 'tray properties' van het computerprogramma ChemCad II versie 2.50 bepaald.

Als ontwerpcriterium wordt voor de werkelijke belastingsfactor 70% van de maximale waarde genomen. De superficiële gassnelheid wordt berekend via:

$$U_{g,s} = 0.70 \lambda_{\max} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3)$$

$U_{g,s}$  : superficiële gassnelheid [m/s]

Op basis van deze gassnelheid en het gasvolumedebiet kan nu het oppervlak van de schotel bepaald worden:

$$A = \frac{\Phi_{v,g}}{U_{g,s}} \quad (4)$$

De diameter van de kolom wordt dan:

$$D = \sqrt{\frac{4A}{\pi}} \quad (5)$$

De vloeistofinhoud is voor Raschig ringen:

$$h_l = 1.22 \left( \frac{U_l^2}{d_r g} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (6)$$

$h_l$  : vloeistof inhoud [m<sup>3</sup><sub>liq</sub>/m<sup>3</sup><sub>pak</sub>]

$d_r$  : diameter pakking [m]

$U_l$  : vloeistofsnelheid =  $\frac{\Phi_{v,l}}{A}$  [m/s]

De droge drukval over de pakking per meter wordt bepaald door:

$$\frac{\Delta P_{dr}}{H} = 0.8 F_p U_g^2 \rho_g \quad (7)$$

$\Delta P_{dr}$  : droge drukval [N/m<sup>2</sup>]

H : hoogte pakking [m]

De natte drukval over de pakking is groter dan de droge drukval, aangezien er minder ruimte vrij is voor het gas. De correctie voor de natte drukval is:

$$\frac{\Delta P_{nat}}{\Delta P_{dr}} = (1 - 3.5 h_1)^{-3} \quad (8)$$

$$\Delta P_{nat} : \text{natte drukval} \quad [\text{N/m}^2]$$

De hoogte van de scheidingskolom wordt bepaald door het berekende aantal theoretische schotels. De hoogte van de pakking, waarvan de scheidende werking overeenkomt met één theoretische schotel, moet daarvoor eerst bepaald worden. Aangezien een theoretische schotel voor gepakte kolommen geen fysische betekenis heeft, vanwege het continue contact tussen de gas- en vloeistoffase zonder evenwichtbereiking, is gekozen de hoogte van de pakking te bepalen aan de hand van het werkelijk plaatsvindende stofoverdrachtsproces:

$$HETP = \frac{2.3 \log(S)}{S - 1} HTU_{og} \quad (9)$$

*HETP* : hoogte van een theoretische schotel [m]

*S* : strippingfactor [-]

*HTU<sub>og</sub>* : overall hoogte overdrachtstrap  
gebaseerd op gasfase weerstand [m]

waarin,

$$S = K \frac{G}{L} \quad (10)$$

*K* : helling evenwichtslijn [-]

*G* : dampbelasting [mol/s]

*L* : vloeistofbelasting [mol/s]

De K-waarde wordt bepaald met ChemCad II versie 2.50. Aangenomen wordt dat de limiterende factor de overdracht van waterstofchloride van de gasfase naar de vloeistoffase is, aangezien ze in de vloeistoffase snel in ionen uiteen zal vallen. De hoogte van de overdrachtstrap zal daarom geheel gebaseerd worden op de gasfase.

Voor de overall hoogte van de overdrachtstrap  $HTU_{og}$  geldt:

$$HTU_{og} = 0.44 E-3 \frac{Re_g^{0.4} Sc_g^{\frac{2}{3}}}{U_l^{0.56}} \quad (11)$$

$Re_g$  : Reynoldsgetal voor gasfase

$$Re_g = \frac{U_g d_p \rho_g}{\eta_g} \quad [-]$$

$Sc_g$  : Schmidtgetal voor gasfase

$$Sc_g = \frac{\eta_g}{D_g \rho_g} \quad [-]$$

$D_g$  : diffusiecoëfficiënt in de gasfase  $[m^2/s]$

De overall hoogte van de overdrachtstrap wordt gecorrigeerd voor optredende stuweffecten met behulp van de figuren 8 en 9 [Krishna, 1991, blz. 90,94]. De totale hoogte van de kolom wordt verkregen door extra ruimte toe te voegen onder en boven de totale pakking (0.5 tot 1 [m] per locatie).

De bovenstaande route is gevolgd voor de absorptie-kolommen T 16 en T 21. De belangrijkste parameters voor het ontwerp zijn getabelleerd in Tabel B3.1.

**Tabel B3.1 : De belangrijkste parameters voor het ontwerp van gepakte absorptiekolommen.**

		Absorptiekolom T 17	Absorptiekolom T 21
Diameter kolom	[ m ]	0.2	1.0
Pakkinghoogte	[ m ]	4.3	5.1
Hoogte kolom	[ m ]	5.5	6.5
<b>Pakking</b>		<b>Raschig ringen (keramiek)</b>	<b>Raschig ringen (keramiek)</b>
Diameter	[ mm ]	50	50
Aantal per m <sup>3</sup>	[ 1/m <sup>3</sup> ]	5800	5800
Fp [1/m]	[ 1/m ]	215	215
Schotel nr.		6	2
Massastroom vlst	[ kg/s ]	1.000	1.519
Massastroom gas	[ kg/s ]	0.017	5.006
Dichtheid vlst	[ kg/m <sup>3</sup> ]	975.5	961.7
Dichtheid gas	[ kg/m <sup>3</sup> ]	1.693	11.48
Flow-parameter	[ - ]	2.512	0.033
Lambda-max	[ m/s ]	0.022	0.081
Ug	[ m/s ]	0.372	0.522
Ul	[ m/s ]	0.039	0.002
vlst inhoud	[ m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> ]	0.178	0.025
Strippingfactor	[ - ]	0.467	0.467
Dg (geschat)	[ m <sup>2</sup> /s ]	2E-5	2E-5
HTU	[ m ]	0.40	0.72
HETP	[ m ]	0.614	1.028
natte drukval	[ atm ]	0.032	0.036

## B4: Warmtewisselaars, condensoren en reboilers

In dit hoofdstuk worden de methoden voor het dimensioneren van warmtewisselaars, condensoren en reboilers besproken.

De procedures en gebruikte relaties zijn verkregen uit *Coulson en Richardson [1991]*.

### Berekeningsprocedures

#### Algemeen

De benodigdheden voor het dimensioneren van een warmtewisselaar zijn: de in- en uitgangstemperaturen van de hoofdstroom, de overgedragen warmte en van het koelende of verwarmende medium de stofgegevens bij de in- en uitgangstemperaturen. Voor de dimensionering is de Kernmethode [*Coulson en Richardson, 1991*] gebruikt.

#### Warmtewisselaars zonder faseovergang

In eerste instantie wordt de massastroom van de 'hulpstroom' bepaald uit de hoeveelheid overgedragen warmte:

$$m_h = \frac{Q}{C_{p_h} \cdot \Delta T_h} \quad (1)$$

Voor de bepaling van het uitwisselend oppervlak, is het gemiddelde temperatuurverschil, de drijvende kracht voor de warmteoverdracht nodig. Deze wordt bepaald volgens:

$$\Delta T_{\ln} = \frac{(T_{in} - t_{uit}) - (T_{uit} - t_{in})}{\ln \frac{(T_{in} - t_{uit})}{(T_{uit} - t_{in})}} \quad (2)$$

waarin:

- $\Delta T_{\ln}$  : logaritmisches temperatuurverschil [°C]
- $T_{in}$  : inlaattemperatuur mantelzijde [°C]
- $T_{uit}$  : uitlaattemperatuur mantelzijde [°C]
- $t_{in}$  : inlaattemperatuur buiszijde [°C]
- $t_{uit}$  : uitlaattemperatuur buiszijde [°C]

Aangezien in de meeste "shell and tube" wisselaars de stroming van het fluidum een mengsel is van gelijk- en tegenstroming, dient het temperatuurverschil gecorrigeerd te worden met een factor, F(S,R) om het gemiddeld temperatuurverschil te verkrijgen. De factor is een functie van de vier temperaturen en het aantal buis- en mantel passages.

Gewoonlijk wordt de factor gecorreleerd als een functie van twee dimensieloze getallen, de warmtecapaciteitsverhouding R en de "temperatuur efficiency" S:

$$R = \frac{T_{in} - T_{uit}}{t_{uit} - t_{in}} = \frac{m_{mantel} \cdot Cp_{mantel}}{m_{buis} \cdot Cp_{buis}} \quad (3a)$$

$$S = \frac{t_{uit} - T_{in}}{T_{in} - t_{in}} \quad (3b)$$

waarin:

- $m_{mantel}$  : massastroom langs de mantelzijde [kg/s]
- $m_{buis}$  : massastroom door de buizen [kg/s]
- $Cp_{mantel}$  : warmtecapaciteit fluïdum mantelzijde [J/kg/°C]
- $Cp_{buis}$  : warmtecapaciteit fluïdum buiszijde [J/kg/°C]

Aan de hand van de waarden van S en R kan de factor F(S,R) worden afgelezen in figuren [Coulson & Richardson, 1991, blz 531-2], afhankelijk van het aantal mantel- en buispassages. Om economische redenen moet F(S,R) groter zijn dan 0.75.

Nu kan het gemiddelde temperatuursverschil worden bepaald via:

$$\overline{\Delta T} = F(S,R) \cdot \Delta T_{in} \quad (4)$$

waarin:

- $\overline{\Delta T}$  : gemiddeld temperatuursverschil [°C]

Het warmte-uitwisselende oppervlak (V.O.) wordt bepaald door:

$$Q = V.O. \cdot U \cdot \overline{\Delta T} \quad (5)$$

waarin Q de, via ChemCad berekende, hoeveelheid overgedragen warmte is en U de geschatte totale overdrachtscoëfficiënt.

Met een gekozen inwendige en uitwendige buisdiameter  $d_i$  en  $d_u$  en buislengte L kan nu het aantal buizen  $N_t$  bepaald worden:

$$N_t = \frac{V.O.}{\pi L d_u} \quad (6)$$



Gekozen is voor een triangulaire steek ( $1.25 \cdot d_u$ ), waardoor een bundeldiameter verkregen wordt van:

$$D_b = d_u \cdot (N_t / K_1)^{1/n_1} \quad (7)$$

waarin  $K_1$  en  $n_1$  constantes zijn, die afhangen van het aantal buispassages:

no. passages	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

Uit [Coulson & Richardson, 1991, blz 522] figuur 12.10 en de bepaalde bundeldiameter kan de "clearance"  $d_{cl}$  tussen de uiterste buizen in de bundel en de inwendige manteldiameter bepaald worden, waarmee de inwendige manteldiameter  $D_i$  bekend wordt:

$$D_i = D_b + d_{cl} \quad (8)$$

(De manteldiameter kan geleverd worden in een veelvoud van 0.05 m.)

De warmtewisselaar is nu gedimensioneerd op de geschatte totale warmteoverdrachtscoëfficiënt  $U$ . Aan de hand van de gekozen configuratie wordt eerst bepaald of de geschatte coëfficiënt  $U$  juist is. Door de partiële warmteoverdrachtscoëfficiënten aan de buis- en mantelzijde te berekenen kan een nieuwe totale overdrachtscoëfficiënt verkregen worden. Vervolgens wordt gekeken of de drukval aan beide zijden van de warmtewisselaar niet de eerder vermelde grenswaarde overschreidt.

#### Bepaling van de totale overdrachtscoëfficiënt $U_o$

De nieuwe totale overdrachtscoëfficiënt  $U_o$  wordt berekend volgens:

$$\frac{1}{U_o} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{od}} + \frac{d_o \ln(d_o/d_i)}{2k_w} + \frac{d_o}{d_i} \cdot \frac{1}{h_{id}} + \frac{d_o}{d_i} \cdot \frac{1}{h_i} \quad (9)$$

waarin:

- $U_o$  : totale overdrachtscoëfficiënt op het buitenoppervlak van de buizen [W/m<sup>2</sup>°C]
- $h_o$  : partiële overdrachtscoëfficiënt van de filmlaag aan de mantelzijde [W/m<sup>2</sup>°C]
- $h_i$  : partiële overdrachtscoëfficiënt van de filmlaag aan de buiszijde [W/m<sup>2</sup>°C]
- $h_{od}$  : 'foulingfactor' buitenzijde buizen [W/m<sup>2</sup>°C]
- $h_{id}$  : 'foulingfactor' binnenzijde buizen [W/m<sup>2</sup>°C]
- $k_w$  : thermische geleidingscoëfficiënt van het buismateriaal [W/m°C]

De beide 'fouling factoren' worden constant genomen op  $6000 \text{ W/m}^2\text{°C}$  en de geleidingscoëfficiënt  $k_w$  op  $16 - 45 \text{ W/m}^2\text{°C}$ .

De methode van Kern maakt voor de bepaling van de partiële overdrachtscoëfficiënt  $h_i$  de gebruik van de empirische relatie:

$$h_i = 4200(1.35 + 0.02 \cdot T_{gem}) u_t^{0.8} / d_i^{0.2} \quad (10)$$

$T_{gem}$  : gemiddelde temperatuur =  $(T_{in} + T_{uit})/2$  [°C]

$u_t$  : lineaire snelheid [m/s]

Bovenstaande formule geldt alleen voor water.

Indien een andere medium door de buizen stroomt, wordt gebruik gemaakt van:

$$\frac{h_i d_i}{k_f} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0.33} \cdot \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (11)$$

waarin:

$k_f$  : thermische geleidbaarheid [W/m°C]

$j_h$  : warmteoverdrachtsfactor, verkregen uit figuur (blz 541) [-]

$Re$  : het getal van Reynolds:  $\frac{\rho u d_i}{\mu}$  [-]

$Pr$  : het getal van Prandtl:  $\frac{C_p \mu}{k_f}$  [-]

$\left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)$  : correctie voor de viscositeit [-]

NB. De thermodynamische grootheden worden bepaald bij de gemiddelde temperatuur!

De stroomprofiel aan de mantelzijde is zeer complex, hetgeen de voorspelling van de partiële overdrachtscoëfficiënt  $h_o$  moeilijker maakt dan het geval was bij de bepaling van  $h_i$ . Kern correleert de warmteoverdrachtsfactor voor de mantelzijde op een zelfde wijze als bij de buiszijde, namelijk door een hypotetische mantelsnelheid en manteldiameter aan te nemen. Aangezien het doorstromend oppervlak varieert over de manteldiameter, worden lineaire en massasnelheden gebaseerd op het maximale oppervlak voor cross-stroming: namelijk in het midden (equator) van de buisbundel. De equivalente manteldiameter wordt berekend door het doorstromend oppervlak tussen de buizen in axiale richting (parallel aan de buizen) en de natte omtrek van de buizen.

Deze is voor een triangulaire steek van de buizen:

$$d_e = \frac{1.10}{d_o} (p_t^2 - 0.917 d_o^2) \quad (12)$$

met:

$d_e$  : equivalente manteldiameter [m]

$p_t$  : steek tussen de buizen [m]

Hierdoor wordt het doorstromend oppervlak aan de mantelzijde:

$$A_s = \frac{(p_t - d_o) D_s l_B}{p_t} \quad (13)$$

met:

$A_s$  : doorstromend oppervlak [m<sup>2</sup>]

$l_B$  : ruimte tussen de baffles [m]

De partiële warmteoverdrachtscoëfficiënt  $h_o$  wordt nu bepaald aan de hand van een gelijkvormige formule als (11) namelijk:

$$\frac{h_o d_e}{k_f} = j_h \cdot Re \cdot Pr^{0.33} \cdot \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (14)$$

De warmteoverdrachtsfactor  $j_h$  wordt verkregen uit de figuur op blz 546.

Indien de nieuw uitgerekenende totale overdrachtcoëfficiënt  $U_o$  boven de gekozen  $U$  ligt, kan de gekozen  $U$  aangehouden worden; anders moet een nieuwe schatting gemaakt worden en alles opnieuw bepaald worden totdat deze wel voldoet.

#### De drukval

Aan de buiszijde wordt de drukval gegeven door:

$$\Delta P_{buis} = N_p \cdot [8j_f \cdot (L/d_i) \cdot (\mu/\mu_w)^{-m} + 2.5] \frac{\rho u_t^2}{2} \quad (15)$$

met:

$\Delta P_{\text{buis}}$	: drukval aan de buiszijde	[Pa]
$N_p$	: aantal buispassages	[-]
$u_t$	: snelheid medium aan de buiszijde	[m/s]
$L$	: lengte van één buis	[m]
$m$	: constante: $m=0.25$ als $Re < 2100$ en $m=0.14$ als $Re > 2100$	[-]
$j_f$	: frictiefactor verkregen uit figuur 12.24	[-]

Indien de drukval te hoog (of te laag) uitkomt, kan het aantal buispassages verlaagd (of verhoogd) worden.

Aan de mantelzijde wordt de drukval gegeven door een soortgelijke vergelijking:

$$\Delta P_{\text{mantel}} = 8j_f \cdot (D_s/d_e) \cdot (L/l_B) \cdot (\mu/\mu_w)^{-0.14} \frac{\rho u_m^2}{2} \quad (16)$$

met:

$u_m$  : superficiële snelheid aan de mantelzijde [m/s]

Indien de drukval te hoog (of te laag) uitkomt, kan de baffle ruimte  $l_b$  aangepast worden. Een verdubbeling van de baffle afstand reduceert de snelheid (aan mantelzijde) met een factor twee; hetgeen de drukval aan deze zijde met een factor 4  $(1/2)^2$  verlaagt.

### Condensoren

De dimensionering van een condensor verloopt op een gelijke wijze als bij een warmtewisselaar (zonder faseovergang) alleen de warmteoverdrachtscoëfficiënt aan de zijde van het condensaat wordt via andere vergelijkingen verkregen.

De twee meest gebruikte type condensoren zijn:

- een horizontaal geplaatste condensor met condensatie aan de mantelzijde
- een verticaal geplaatste condensor met condensatie aan de buiszijde

condensatie buiten horizontale buizen (methode van Kern):

$$h_c = 0.95 k_L \cdot \left[ \frac{\rho_L (\rho_L - \rho_v) g}{\mu_L \frac{w_c}{LN_t}} \right]^{1/3} \cdot N_r^{-1/6} \quad (17)$$

waarin:

$h_c$	: condensatie film coëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> °C]
$k_L$	: thermische geleidbaarheid	[W/m°C]
$W_c$	: totale condensaatstroom	[kg/s]
$N_r$	: gemiddeld aantal buizen in een verticale buisrij	[-]

condensatie in verticale buizen:

Aan de hand van het getal van Reynolds en het getal van Prandtl kan via figuur 12.43 [Coulson en Richardson, 1991, blz 572] de condensatie film coëfficiënt  $h_c$  gevonden worden:

$$Re_c = \frac{4W_c}{N_r \pi d_i \mu_L} \quad Pr_c = \frac{Cp \mu_L}{k_L}$$

$$h_c = Y \cdot k_L \cdot \left[ \frac{\mu_L^2}{\rho_L (\rho_L - \rho_V) g} \right]^{-1/3} \quad (18)$$

met:

$$Y : \text{asafsnode van figuur 12.43} \quad [-]$$

NB. Het logaritmische temperatuurverschil  $\Delta T_{ln}$  wordt nu:

$$\Delta T_{ln} = \frac{(t_2 - t_1)}{\ln \left[ \frac{T_{sat} - t_1}{T_{sat} - t_2} \right]} \quad (19)$$

### reboilers

De reboiler is gemodelleerd met het type thermosyphon. Dit is een verticale reboiler met verdamping aan de buiszijde of een horizontale reboiler met verdamping aan de mantelzijde. De vloeistofcirculatie door de wisselaar wordt verkregen door het verschil in dichtheid tussen het twee-fase-mengsel van gas en vloeistof en de vloeistof onder in de kolom. Hier is gekozen voor een verticaal opgestelde thermosyphon. Deze is het economische type reboiler voor de meeste applicaties. Een nadeel is ten opzichte van de horizontaal geplaatste thermosyphon is het onderhoud. De buizenbundel kan bij horizontale plaatsing gemakkelijker verwijderd worden.

Het ontwerp kan niet expliciet bepaald worden. Een ingewikkelde iteratieve procedure moet toegepast worden om de circulatiesnelheid, warmteoverdrachtssnelheid en drukval - alle drie hangen met elkaar samen - juist te bepalen.

Vandaar dat een vereenvoudigde methode wordt toegepast. Hiervoor wordt met behulp van de gereduceerde temperatuur uit figuur 12.59 [*Coulson en Richardson, 1991, blz 601*] een ontwerp warmteflux verkregen. Aan de hand van deze flux en de warmteoverdracht kan een uitwisselend oppervlak berekend worden. Er is maar één buis- en één mantelpassage, zodat het aantal buizen bepaald kan worden en vervolgens een bundel- en manteldiameter. De diameter van de uitlaatpijp wordt verkregen uit het totale buisoppervlak van de doorsnede.

In tabel B4.1 staan de belangrijkste parameters van de warmtewisselaars H3A, H5, H7, H16 en H20, condensoren H10, H11 en H24 en reboiler H19 getabelleerd.

Tabel B4: Overzichtstabel met de belangrijkste parameters van de gedimensioneerde warmtewisselaars, condensoren en reboilers

		H 3A	H 5	H 7	H 10	H 11
<b>type:</b>		koeler	koeler	warmtewisselaar	brine-condensor	condensor
aantal tubepassages	[ - ]	-	2	2	-	4
aantal shellpassages	[ - ]	-	1	1	-	2
binnendiameter buizen, di	[ mm ]	-	20	20	-	20
buitendiameter buizen, du	[ mm ]	-	25	25	-	25
steek, s	[ mm ]	-	32	32	-	32
soort steek	[ - ]	-	triangulair	triangulair	-	triangulair
lengte buizen, L	[ m ]	-	3	6	-	6
aantal buizen	[ - ]	-	210	714	-	862
aantal buizen per passage	[ - ]	-	105	357	-	216
baffle spacing	[ mm ]	-	-	-	-	210
manteldiameter, D shell	[ m ]	-	0.65	0.95	-	1.05
<b>buis-zijde</b>		koelwater	processtroom	processtroom	processtroom	koelwater
dichtheid	[ kg/m <sup>3</sup> ]	-	1001	976	-	995
viscositeit	[ mNs/m <sup>2</sup> ]	-	0.27	0.27	-	0.8
geleidbaarheid	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	-	0.58	0.58	-	0.59
totaal doorstroomd oppervlak	[ m <sup>2</sup> ]	-	0.09	0.112	-	0.068
massadebiet, G	[ kg/m <sup>2</sup> /s ]	-	3504	2684	-	1907
lineaire snelheid	[ m/s ]	-	3.4	2.7	-	1.92
overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	-	7623	6997	-	5242
drukval	[ kPa ]	-	-	-	-	54
<b>mantel-zijde</b>		gasstroom	koelwater	m.d. stoom	brine	cond. stroom
dichtheid	[ kg/m <sup>3</sup> ]	-	995	931 / 1.53	-	867.85 / 1.8
viscositeit	[ mNs/m <sup>2</sup> ]	-	0.8	0.21 (L)	-	0.4 (L)
geleidbaarheid	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	-	0.59	0.688 (L)	-	0.38 (L)
totaal doorstroomd oppervlak	[ m <sup>2</sup> ]	-	0.09	-	-	0.048
massadebiet, G	[ kg/m <sup>2</sup> /s ]	-	746	-	-	217
lineaire snelheid	[ m/s ]	-	0.8	-	-	0.3
overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	-	5102	7945	-	4491
drukval	[ kPa ]	-	-	-	-	16
totale overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	-	1023	1100	-	975

		H 16	H 19	H 20	H 24
<b>type:</b>		koeler	reboiler	koeler	condensor
aantal tubepassages	[ - ]	4	1	2	2
aantal shellpassages	[ - ]	2	1	1	1
binnendiameter buizen, di	[ mm ]	20	20	20	20
buitendiameter buizen, du	[ mm ]	25	25	25	25
steek, s	[ mm ]	32	32	32	32
soort steek	[ - ]	triangulair	triangulair	triangulair	triangulair
lengte buizen, L	[ m ]	3	2	3	6
aantal buizen	[ - ]	75	65	110	848
aantal buizen per passage	[ - ]	19	65	55	424
baffle spacing	[ mm ]	73	11	81	17
manteldiameter, D shell	[ m ]	0.35	0.30	0.40	1.00
<b>buis-zijde</b>		koelwater	medium	koelwater	brine water
dichtheid	[ kg/m <sup>3</sup> ]	995	783 / 2.37	995	1005
viscositeit	[ mNs/m <sup>2</sup> ]	0.8	0.25 / 0.01	0.8	1.4
geleidbaarheid	[ W/m/°C ]	0.59	0.16 / 0.01	0.59	0.59
totaal doorstroomd oppervlak	[ m <sup>2</sup> ]	0.006	--	0.017	0.133
massadebiet, G	[ kg/m <sup>2</sup> /s ]	1771	--	1039	583
lineaire snelheid	[ m/s ]	1.78	--	1.1	0.6
overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	4941	--	3225	921
drukval	[ kPa ]	41	--	9	--
<b>mantel-zijde</b>		water	L.P. stoom	gas	processtroom
dichtheid	[ kg/m <sup>3</sup> ]	941	1.45	956 / 11.3	766 / 2.73
viscositeit	[ mNs/m <sup>2</sup> ]	0.419	--	0.47	0.2
geleidbaarheid	[ W/m/°C ]	0.67	--	0.65	0.14
totaal doorstroomd oppervlak	[ m <sup>2</sup> ]	0.006	0.008	0.007	--
massadebiet, G	[ kg/m <sup>2</sup> /s ]	425	40.3	754	--
lineaire snelheid	[ m/s ]	0.45	27.80	0.79	--
overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	3793	--	4504	949
drukval	[ kPa ]	25	--	62	--
totale overdrachtscoëfficiënt	[ W/m <sup>2</sup> /°C ]	1100	895	1000	500



## B5: Accumulatoren en scheidingsvaten

Stroom gegevens vat V4

$$Q_{mliq} := 295.6 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{sec}}$$

$$Q_{mvap} := 5.471 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{sec}}$$

$$T := 110.5 \cdot \text{deg}$$

$$\rho_{liq} := 1033.6 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$\rho_{vap} := 9.453 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

$$P := 11.0 \cdot \text{atm}$$

$$Q_{vliq} := \frac{Q_{mliq}}{\rho_{liq}}$$

$$Q_{vvap} := \frac{Q_{mvap}}{\rho_{vap}}$$

$$Q_{vliq} = 0.286 \cdot \text{m}^3 \cdot \text{sec}^{-1}$$

$$Q_{vvap} = 0.579 \cdot \text{m}^3 \cdot \text{sec}^{-1}$$

$$cP = 0.001 \cdot \frac{\text{kg}}{(\text{m} \cdot \text{sec})}$$

$$\mu_{liq} := 0.2624 \cdot cP$$

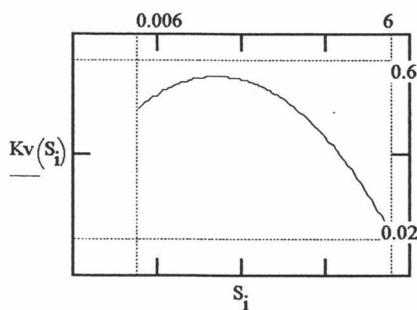
$$\mu_{vap} := 0.020427 \cdot cP$$

Nu kan de scheidings factor worden berekend:

$$\text{Scheid\_Factor} := \frac{Q_{mliq}}{Q_{mvap}} \cdot \sqrt{\frac{\rho_{vap}}{\rho_{liq}}} \quad \text{Scheid\_Factor} = 5.167$$

$$K_v(S) := \exp(-0.131234 \cdot \ln(S)^2 - 0.778076 \cdot \ln(S) - 1.964278)$$

$$i := 0..100 \quad S_i := \exp\left[\ln(0.006) + \left(\frac{\ln(6) - \ln(0.006)}{100} \cdot i\right)\right]$$



$$K_v := K_v(\text{Scheid\_Factor})$$

$$K_v = 0.027 \quad (\text{Design vapor velocity factor})$$

$$K := 1.25 \cdot K_v \quad (\text{Correctie horizontaal vat})$$

$$U_{vmax} := K \cdot \sqrt{\frac{\rho_{liq}}{\rho_{vap}}} - 1 \cdot \frac{\text{ft}}{\text{sec}}$$

$$U_{vmax} = 0.109 \cdot \text{m} \cdot \text{sec}^{-1}$$

Vereist oppervlak voor gasflow:

$$A_{vmin} := \frac{Q_{vvap}}{U_{vmax}} \quad A_{vmin} = 5.32 \cdot \text{m}^2$$

Er moet voldoende volume aanwezig zijn om in- en uitgaande stromen op te vangen indien er up- of downstream iets mis gaat. Hoelang deze stromen moeten kunnen worden opgevangen is afhankelijk van de mate van controle op het vat en de mate van controle op de andere eenheden.

Instrument\_Factor := 1.5·min (LC geen alarm) Labor\_Factor := 2·min (Kwaliteit werk goed)

Operating\_Factor := 2 (Externe eenheden onder goede controle)

Holding\_Time := Instrument\_Factor + Labor\_Factor Holding\_Time = 3.5·min

Full\_Liquid\_Volume := Qvliq·(Instrument\_Factor + Labor\_Factor)·Operating\_Factor

Full\_Liquid\_Volume = 120.116·m<sup>3</sup>

$$A_{totmin} := \frac{A_{vmin}}{0.2} \quad A_{totmin} = 26.601 \cdot m^2$$

$$D_{min} := \sqrt{4 \cdot \frac{A_{totmin}}{\pi}} \quad D_{min} = 5.82 \cdot m \quad D := \text{ceil}\left(\frac{D_{min}}{6 \cdot \text{in}}\right) \cdot 6 \cdot \text{in} \quad D = 5.944 \cdot m$$

$$L := \frac{\text{Full\_Liquid\_Volume}}{\left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D^2} \quad L = 4.329 \cdot m \quad \frac{L}{D} = 0.728$$

L/D < 3. Dit is geen economische L/D verhouding (3 < L/D < 5). Opnieuw dimensioneren

MinLiqLevel := 0.06 schatting percentage oppervlak ingenomen door min.vloeistof niveau

LiqSpace := 0.86 - MinLiqLevel LiqSpace = 0.8 beginschatting

LiqSpace := 0.8414 LiqSpace = 0.841 iteratie 1

LiqSpace := 0.84023 LiqSpace = 0.84 iteratie 2

Met Nomogram 5.4 kan een beginschatting worden gemaakt voor de diameter van het vat

$$HT := 11.9 \cdot \frac{\ln\left(\frac{\text{Holding\_Time}}{\text{min}}\right)}{\ln(60)} \quad \text{Hoogte in cm t.o.v. basislijn} \quad HT = 3.641$$

$$LS := 11.88 - 4 \cdot \frac{\ln(\text{LiqSpace}) - \ln(0.2)}{\ln(0.4) - \ln(0.2)} \quad LS = 3.597$$

$$\text{IndexA} := HT + (LS - HT) \cdot \frac{0.88}{2.15} \quad \text{IndexA} = 3.623$$

$$FR := 12.6 \cdot \frac{\ln\left(\frac{\frac{Q_{vliq}}{\left(\frac{\text{gal}}{\text{hr}}\right)} \cdot 100}{70000}\right)}{\ln\left(\frac{70000}{100}\right)}$$

Hoogte in cm t.o.v. basislijn

FR = 15.21

$$\text{IndexB} := \text{IndexA} + (\text{FR} - \text{IndexA}) \cdot \frac{4.7}{9.35}$$

IndexB = 9.448

Kies een L/D verhouding: LoverD := 3.08

$$LD := 5 + \frac{\ln(\text{LoverD})}{\ln(10)} \cdot 4.5$$

LD = 7.198

$$D := LD - \frac{LD - \text{IndexB}}{2.25} \cdot 4.55$$

D = 11.747

$$D := \exp\left[\frac{D - 12.6 + \frac{4}{\ln(2)} \cdot \ln(12)}{\left(\frac{4}{\ln(2)}\right)}\right] \cdot \text{ft}$$

$$D := \text{ceil}\left[\frac{D}{(6 \cdot \text{in})}\right] \cdot 6 \cdot \text{in}$$

D = 3.2·m

L := LoverD·D

L = 9.857·m

Met behulp van Nomogram 5.5 kan het percentage van het oppervlak worden berekend wat in beslag wordt genomen door een segment met hoogte A:

$$P(A, D) := \frac{A}{\left(\frac{D}{2}\right)}$$

$$\text{Func1}(A, D) := \frac{\arccos(1 - P(A, D)) - (1 - P(A, D)) \cdot \sqrt{(2 \cdot P(A, D) - P(A, D)^2)}}{\pi}$$

$$\text{Func2}(A, D) := 1 - \frac{\arccos(P(A, D) - 1) - (P(A, D) - 1) \cdot \sqrt{(2 \cdot P(A, D) - P(A, D)^2)}}{\pi}$$

$$\text{Area}(A, D) := \text{if}(P(A, D) \leq 1, \text{Func1}(A, D), \text{Func2}(A, D))$$

Verdere dimensionering is nodig om voldoende vloeistof holdup en dampscheidings ruimte te verkrijgen. Er moet een minimaal vloeistof niveau zijn en als regel is de minimale damruimte 1/5 van de vatdiameter is of 12 inch:

$$\text{MinLiqSpace} := 6 \cdot \text{in} \quad \text{MinVapSpace} := \text{if}(D < 60 \cdot \text{in}, 12 \cdot \text{in}, 0.2 \cdot D)$$

$$\text{MinVapSpace} = 25.2 \cdot \text{in}$$

$$\text{LiqSpace}(D) := (1 - \text{Area}(\text{MinLiqSpace}, D) - \text{Area}(\text{MinVapSpace}, D)) \cdot 100$$

LiqSpace(D) = 84.023 %      Nieuwe schatting voor percentage oppervlak voor vloeistof.  
Bereken weer met dit oppervlak een nieuwe D en L.

Er vindt meesleuring plaats in de dampruimte. Daarom moet de snelheid hier zodanig laag zijn dat druppeltjes met een diameter  $\geq D_p$  onder invloed van de zwaartekracht kunnen settelen. Deze berekening vindt plaats in Nomogram 5.6

$$V_{load} := Q_{vvap} \cdot \sqrt{\frac{\rho_{vap}}{\rho_{liq} - \rho_{vap}}}$$

$$V_{load} = 0.056 \cdot m^3 \cdot sec^{-1}$$

$$VapSpace := MinVapSpace$$

$$VapSpace = 25.2 \cdot in$$

$$VS := 11.8 \cdot \frac{\ln\left(\frac{VapSpace}{in}\right) - \ln(100)}{\ln(12) - \ln(100)} \cdot 11.8$$

Hoogte in cm t.o.v. basislijn

$$VS = 4.129$$

$$Area(VapSpace, D) = 0.142$$

$$DA := 7.25 \cdot \frac{\ln(Area(VapSpace, D)) - \ln(0.8)}{\ln(0.1) - \ln(0.8)} \cdot 5.8 \quad DA = 2.435$$

$$IndexA := 2.73 \cdot \frac{DA - VS}{1.4}$$

$$IndexA = -3.303$$

$$ut := \frac{V_{load}}{Area(VapSpace, D) \cdot \left(\frac{\pi \cdot D^2}{4}\right) \cdot L} \cdot VapSpace$$

$$Rdh := \frac{ut}{0.227 \cdot \frac{ft}{sec}}$$

$$Rdh = 0.046$$

Kies een design snelheidsverhouding R<sub>dh</sub>:  $Rdh := 0.167$

$$VR := 0.9 + 11.27 \cdot \frac{\ln(Rdh) - \ln(0.04)}{\ln(0.5) - \ln(0.04)}$$

$$VR = 7.277$$

$$0.227 \cdot \frac{\pi}{4} = 0.178$$

$$IndexB := IndexA + \frac{1.9}{3.4} \cdot (VR - IndexA)$$

$$IndexB = 2.609$$

$$V_{load} := 0.58 \cdot \frac{ft^3}{sec}$$

$$VL := 1.2 + \frac{\ln\left[\frac{V_{load}}{\left(\frac{ft^3}{sec}\right)}\right] - \ln(0.005)}{\ln(100) - \ln(0.005)} \cdot 9.2$$

$$VL = 5.616$$

$$IndexC := IndexB + (VL - IndexB) \cdot \frac{10.1}{6.35}$$

$$IndexC = 7.391$$

Bereken nu uitgaande van de geschatte diameter de lengte. Indien die kleiner is dan de geschatte lengte gebruik dan de geschatte lengte. Kies anders de nieuwe lengte als L/D tussen 3 en 5. Indien dit niet het geval is kies een hele nieuwe diameter en begin opnieuw.

Hoogte in cm t.o.v basislijn

$$ID := 0.8 + 11.6 \cdot \frac{\ln\left(\frac{D}{ft}\right) - \ln(1.5)}{\ln(12) - \ln(1.5)}$$

$$ID = 11.655$$

$$L_{nieuw} := L$$

Given

$$1.67 + \frac{\ln\left(\frac{L_{nieuw}}{ft}\right) - \ln(4)}{\ln(90) - \ln(4)} \cdot 9.92 = ID - (ID - IndexC) \cdot \frac{1.73}{0.87}$$

$$L_{nieuw} := \text{Find}(L_{nieuw})$$

$$L_{nieuw} = 6.419 \cdot ft \quad L = 32.34 \cdot ft$$

De nieuwe lengte is kleiner dan de beginschatting => Stop

## Bijlage C: Berekeningen van de economische aspecten

### C.1 schatting van investeringen volgens Taylor

De totale capaciteit van de fabriek is 100 kTon/jaar = 274 ton/dag.

Het proces is opgesplitst in aantal processecties:

reactie-, scheidings- en afgas-zuiveringssectie

In tabel C.I staat de berekening van de 'costliness index' van het proces. Hierbij is gebruik gemaakt van een 'scoringstabel' uit Montfoort, deel II, blz III-20-.

Tabel C.I: bepaling van de 'costliness index'

	Doorzet score	Construc. materiaal score	Druk / Temp. score	Overig score	Totale score	Costliness Index
<b>Proces:</b>						
reactie	8.3	3	1	0	12.3	25.2
afgaszuivering	1.2	1	1	0	3.2	2.3
scheiding	2.2	1	0.3	0	3.5	2.5
<b>Stromen:</b>						
		<b>Opslag</b>				
etheen	-1	1	0	1 (explosief)	1	1.3
lucht	1	0	0	0	1	1.3
zouzuuopl.	-3	0	0	1 (corrosief)	-2	0.6
aceetaldehyde	0	1	0	0	1	1.3
light-ends	-3	0	0.07	0	-2.9	0.5
heavy-ends	-1	2	0	0	1	1.3
gechloreerd	-3	2	0	0	-1	0.8
afgas (H.D.)	0.5	2	1	0	3.5	2.5
afgas (L.D.)	-3	0	0	0	-3	0.5
					<b>Totaal:</b>	<b>40.1</b>

De procescapaciteit P is 107 kTon/jaar; de EPE  $C_1$  index geëxtrapoleerd naar 1992 bedraagt 900, dus worden de investeringen voor de batery limits:

$$I_B = \$ 69.109.000,- = \text{fl. } 127.852.000,-$$

Uit de verhoudingen tussen de verschillende investeringen (formule 8.1) volgt nu voor de andere investeringen:

$$\begin{aligned} I_H &= \text{fl. } 31.963.000,- \\ I_L &= \text{fl. } 27.968.000,- \\ I_W &= \text{fl. } 11.986.000,- \end{aligned}$$

De totale investeringen komen nu op fl. 199.769.000,- . Er wordt echter een post onvoorzien meegenomen van 30%, zodat de uiteindelijke investeringen fl. 259.699.000,- zullen bedragen.

## C.2 schatting van investeringen volgens Miller

In tabel C.II is van de procesapparatuur de kostprijs bepaald.

Tabel C.II: kostprijzen van de procesapparatuur.

Soort apparaat	Code	Kostprijs [ fl. ]
Reactor	R1	1.536.350,-
Reactor	R6	2.898.750,-
Koeler	H3	116.000,-
Koeler	H5	364.000,-
Warmtewisselaar	H7	1.400.000,-
Condensor	H10	423.000,-
Condensor	H11	350.000,-
Koeler	H16	28.000,-
Verdamper	H19	35.000,-
Koeler	H20	48.000,-
Condensor	H24	315.000,-
Destillatietoren (+ schotels)	T12	126.800,-
Absorptietoren (+ pakking)	T17	62.300,-
Destillatietoren (+ schotels)	T18	96.400,-
Absorptietoren (+ pakking)	T21	97.000,-
Destillatietoren (+ schotels)	T22	446.000,-
Compressor	C2	175.000,-
Compressor	C3	434.000,-
Pomp	P8	533.000,-
Pomp	P23	9.200,-
Gas/vloeistofscheider	V4	1.575.000,-
Flashvat	V9	1.085.000,-
Opslagvat	V13	69.000,-
Gas/vloeistofscheider	V14	26.000,-
Opslagvat	V15	69.000,-
Accumulator	V25	26.000,-
Totaal		12.343.800,-

### C.3 grondstoffen en hulpmiddelen $K_p$

In tabel C.III is van de grondstoffen, hulpstoffen en hulpmiddelen de kostprijs bepaald.

Tabel C.III: kostprijzen van de grondstoffen, hulpstoffen en hulpmiddelen.

Soort	Eenheidsprijs	Hoeveelheid	Kostprijs [fl./jaar]
grondstoffen			
etheen	fl. 818,63/ton	72576 ton/jaar	59.410.000,-
hulpstoffen			
koelwater	fl. 0,05 /ton	6828480 ton/jaar	340.000,-
pekelwater	fl. 0,20 /ton	2232864 ton/jaar	450.000,-
ammonia	fl. 264,30/ton	45504 ton/jaar	6.830.000,-
lage-druk stoom	fl. 22,-/ton	265536 ton/jaar	5.840.000,-
waterstofchloride	fl. 270,-/ton	1863 ton/jaar	503.000,-
electriciteit	fl. 0,10/kWh	25001229 kWh/jaar	2.500.000,-
katalysator-oplossing*			
palladiumchloride	fl. 91,60/kg	419 kg/jaar	38.395,-
koper(I)chloride	fl. 9,16/kg	2787 kg/jaar	25.530,-
koper(II)chloride	fl. 9,44/kg	37855 kg/jaar	357.275,-
waterstofchloride	fl. 0,27/kg	1011 kg/jaar	275,-
azijnzuur	fl. 0,84/kg	29899 kg/jaar	25.005,-
Totaal	$K_p$		fl. 76.319.500,-

\* De katalysator wordt afgeschreven over vijf jaar. Bovenstaande prijs is dus een vijfde van de totale katalysatorkosten. De totale hoeveelheid van de in het systeem aanwezige katalysator-oplossing wordt geschat op iets minder dan 2 maal de som van de reactorvolumes, namelijk 1500 m<sup>3</sup>.



#### C.4 Inkomsten F

In tabel C.IV is de kostprijs van de produkten weergegeven.

Tabel C.IV: kostprijs van de produkten.

Stof	Eenheidsprijs [fl./ton]	Hoeveelheid [ton/jaar]	Kostprijs [fl./jaar]
aceetaldehyde	1812,-	107165	194.177.000,-
stikstof (hoge druk)	240,-	143856	34.525.400,-
Totaal	F		228.702.400,-

#### C.5 Bepaling Return on Investment ROI

In tabel C.V is van de kostprijs van de produkten bepaald.

Tabel C.IV: Bepaling Return on Investment voor 100 en 90 % benuttingsgraad.

	100 %	90 %
Totale inkomsten	fl. 228.702.400,-	fl. 205.832.200,-
Totale kosten	fl. 102.556.000,-	fl. 92.300.400,-
Netto opbrengst	fl. 126.146.400,-	fl. 113.531.800,-
Afschrijving	fl. 11.109.600,-	fl. 11.109.600,-
Rentekosten	fl. 5.152.400,-	fl. 5.152.400,-
Belastbaar inkomen	fl. 109.824.400,-	fl. 97.209.800,-
Inkomen na belasting (50%)	fl. 54.912.200,-	fl. 48.604.900,-
ROI	46.9 %	41.5 %

## C.6 Bepaling Internal Rate of Return IRR

De IRR wordt gevonden door de cash-flows (inversteringen en werkkapitaal) terug te rekenen naar de huidige waarde voor de looptijd van de fabriek. Gesteld wordt dat de fabriek na deze 10 jaar geen restwaarde heeft. Na de looptijd moet de som van de verdisconteerde cash-flows gelijk aan nul zijn. De cash-flow in jaar  $i$  wordt verdisconteerd naar zijn huidige waarde volgens:

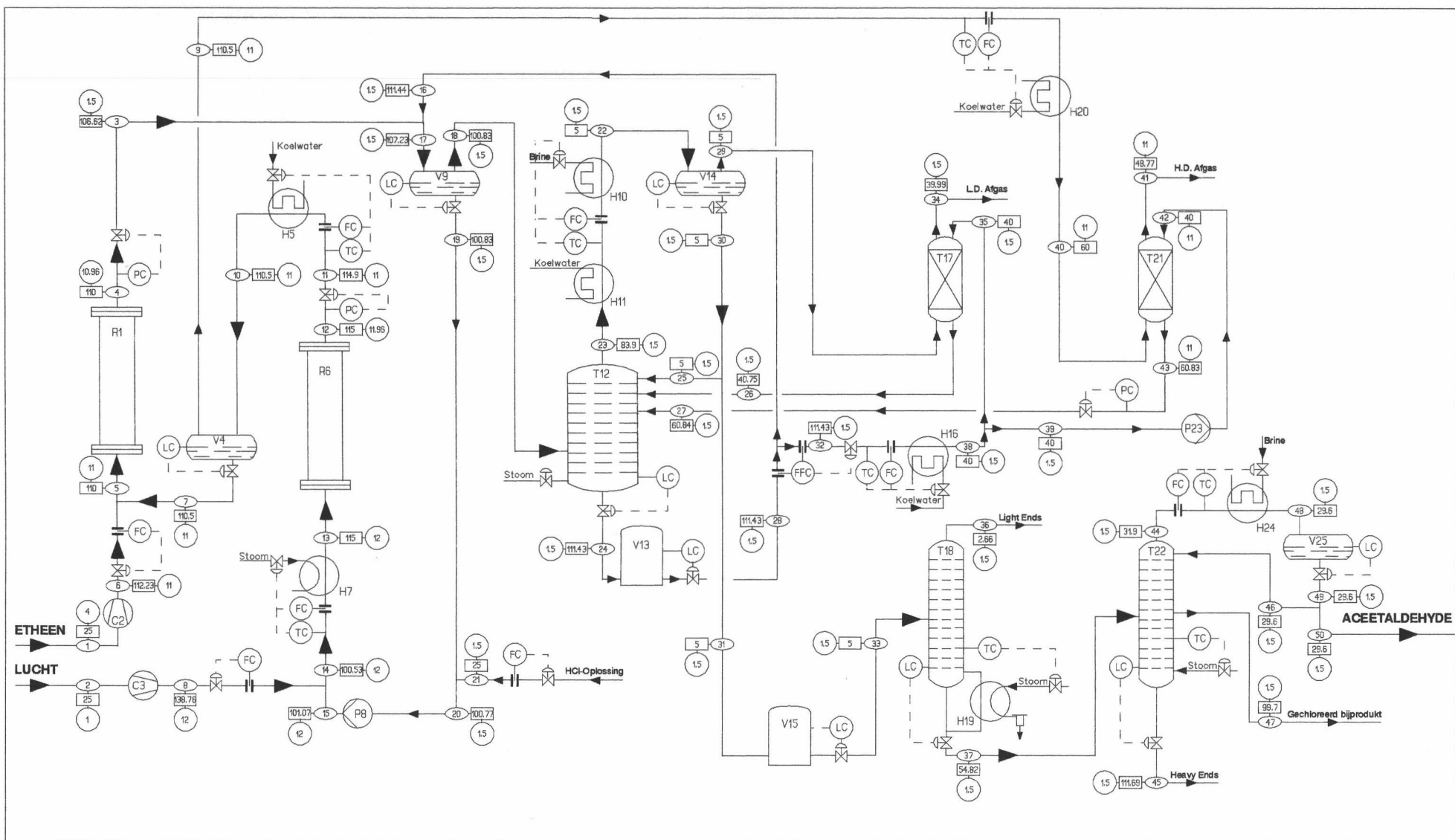
$$Cf_i^{\text{verdisconteerd}} = \frac{Cf_i}{(1+IRR)^i} \quad (1)$$

Door middel van iteratie wordt nu IRR gevonden. In tabel C.IV is zijn de cash-flows en de verdisconteerde cashflows over de afschrijvingsduur van 10 jaar weergegeven.

Tabel C.VI: Cash-flows over de afschrijvingsduur van 10 jaar

Jaar	Cash-flow [fl.]	Verdisconteerde Cash-flow [fl.]
0	-117.100.000,-	-117.100.000,-
1	52.804.406,-	36.489.517,-
2	53.251.188,-	25.428.761,-
3	53.697.971,-	17.719.510,-
4	54.144.753,-	12.346.622,-
5	54.591.535,-	8.602.309,-
6	55.038.317,-	5.993.118,-
7	55.485.099,-	4.175.053,-
8	55.931.882,-	2.908.326,-
9	56.378.664,-	2.025.799,-
10	56.825.446,-	1.410.985,-

Door handmatig te itereren is de IRR bepaald op 44.7 %.



R1	OXIDATIE REACTOR	H10	PEKELKOELER	H19	REBOILER
C2	ETHEEN COMPRESSOR	H11	WATERKOELER	H20	WATERKOELER
C3	LUCHT COMPRESSOR	T12	CRUDE TOREN	T21	AFGAS STRIPPER
V4	ONTGASSING KATALYSATOR	V13	OPSLAGVAT WATER	T22	HEAVY ENDS DESTILLATIE
H5	WARMTEWISSELAAR	V14	L/V SCHEIDER	P23	WATER POMP
R6	REGENERATIE REACTOR	V15	OPSLAGVAT ACEETALDEHYDE	H24	CONDENSOR
H7	WARMTEWISSELAAR	H16	WATERKOELER	V25	OPSLAG VAT
P8	KATALYSATOR POMP	T17	AFGAS STRIPPER		
V9	FLASH VAT	T18	LIGHT ENDS DESTILLATIE		

**PRODUCTIE VAN ACEETALDEHYDE**

R.Louwe Kooijmans  
W.P.Wolterbeek

Stroomnummer   
 Temperatuur in °C   
 Absolute druk in atmosfeer