

Vakgroep Chemische Procestechnologie

Verslag behorende
bij het fabrieksvoorontwerp
van

P.B. Klunder

B.J. Vos

onderwerp:

Waterstofopslag door hydrogenering
van toluen tot methylcyclohexaan

adres: Piet Heinstraat 62
2628 RL Delft
015 - 626069

opdrachtdatum: september 1991

verslagdatum: juli 1992

Samenvatting.

In dit fabrieksvoorontwerp wordt een proces beschreven voor de hydrogenering van toluen. Het doel van het proces is waterstof te binden aan een dragermateriaal waardoor het eenvoudiger is op te slaan.

De hydrogenering van toluen tot methylcyclohexaan is exotherm. In dit proces is geprobeerd de energie, die bij de hydrogeneringsreactie vrijkomt, zo volledig mogelijk te benutten.

De hydrogeneringscapaciteit van de fabriek is gelijk aan 2730 kg waterstof per uur. Deze stroom waterstof heeft een energie-inhoud van ongeveer 100 MW.

De hydrogeneringsreactie wordt uitgevoerd in zes in serie geplaatste adiabatische katalysatorbedden. Het reaktiemengsel wordt tussen elk katalysatorbed gekoeld. De druk is gelijk aan 22 bar, de reactietemperatuur ligt tussen 550 en 650 K. De katalysator is een nikkel op silica-aerogel. Het gevormde methylcyclohexaan heeft een zuiverheid van 98.5 %.

Voor de dehydrogeneringsreactie van methylcyclohexaan naar toluen wordt het proces globaal besproken.

Voor het opslaan van waterstof langer dan circa 2,5 maand is het proces rendabel.

Conclusies.

Het in dit fabrieksvoorontwerp beschreven proces biedt mogelijkheden voor het opslaan van waterstof voor langere perioden. Methylcyclohexaan is dan goedkoper te vervoeren en op te slaan.

Uit oogpunt van veiligheid dient het verminderde explosie gevaar van methylcyclohexaan ten opzichte van waterstof afgewogen te worden tegen de grotere giftigheid van methylcyclohexaan.

In dit proces is getracht de reactiewarmte zo volledig mogelijk te benutten. Het zal echter de flexibiliteit en de beheersbaarheid van het proces ten goede komen wanneer deze warmteintegratie minder ver wordt doorgevoerd. Een mogelijkheid is om voor het opwarmen van de toluenvoeding gebruik te maken van stoom wat elders in het proces wordt opgewekt in plaats van direct warmte uitwisselen met processtromen.

<u>INHOUDSOPGAVE.</u>	blz.
SAMENVATTING	I
CONCLUSIES	II
I. INLEIDING.	1
II. UITGANGSPUNTEN VOOR HET ONTWERP.	3
II.1. UITGANGSPUNTEN VOOR HET HYDROGENERINGSPROCES.	3
II.2. UITGANGSPUNTEN VOOR HET DEHYDROGENERINGSPROCES.	3
II.3. FYSISCHE CONSTANTEN VAN DE GEBRUIKTE STOFFEN.	4
III. BESCHRIJVING VAN DE PROCESSEN.	6
III.1. BESCHRIJVING VAN HET HYDROGENERINGSPROCES	6
III.1.1. Algemeen.	6
III.1.2. Beschrijving hydrogeneringssectie.	6
III.1.3. Procesregeling hydrogeneringssectie.	7
III.1.4. Steamplant.	8
III.1.5. Flexibiliteit van het proces.	8
III.1.6. Inbedrijfstelling.	8
III.2. BESCHRIJVING VAN HET DEHYDROGENERINGSPROCES.	9
III.2.1. Algemeen.	9
III.2.2. Procesregeling dehydrogeneringssectie.	9
III.2.3. Flexibiliteit van het proces.	9
III.2.4. Inbedrijfstelling.	10
IV. PROCESKONDITIES.	11
IV.1. PROCESKONDITIES VAN HET HYDROGENERINGSPROCES.	11
IV.1.1. Thermodynamica en oplosbaarheid.	11
IV.1.2. Reaktiewarmte.	11
IV.1.3. Reactie-evenwicht.	12
IV.1.4. Katalysator en reactiekinetiek.	13
IV.1.5. Druk en temperatuur.	14

IV.2. PROCESKONDITIONES VAN HET DEHYDROGENERINGSproces.	15
IV.2.1. Thermodynamica en oplosbaarheid.	15
IV.2.2. Reaktiewarmte.	15
IV.2.3. Reactie-evenwicht.	15
IV.2.4. Katalysator en reaktiekinetiek.	15
IV.2.5. Druk en temperatuur.	16
V. APPARATUURKEUZE EN BEREKENING.	17
V.1. HYDROGENERINGSproces.	17
V.1.1. Reactoren.	17
V.1.2. Warmtewisselaars.	19
V.1.3. Fasenscheidingen.	20
V.2. DEHYDROGENERINGSproces.	21
V.2.1. Reactoren.	21
V.2.2. Warmtewisselaars.	21
V.2.3. Fasenscheidingen.	21
VI. MASSA- en WARMTEBALANSEN.	22
VII. OVERZICHT SPECIFIKATIE APPARATUUR.	34
VIII. ECONOMISCHE BESCHOUWINGEN.	48
VIII.1. PRODUKTIE AFHANKELIJKE KOSTEN	48
VIII.2. LOONAFHANKELIJKE KOSTEN	49
VIII.3. INVESTERINGSKOSTEN	49
VIII.4. TOTALE KOSTEN	50
VIII.4.1. Rente	50
VIII.4.2. Afschrijving	50
VIII.5. ECONOMISCHE CRITERIA	51
VIII.5.1. Pay out time (POT)	51
VIII.5.2. Return on interest (ROI)	51
VIII.5.3. Vergelijk met andere opslagmogelijkheden	51
IX. SYMBOLENLIJST	54
X. LITERATUURLIJST	56

I. INLEIDING.

De milieuproblemen die in de laatste decennia zijn ontstaan hebben geleid tot onderzoek naar schone brandstoffen. Een van de brandstoffen waarvoor een toekomst lijkt te bestaan is waterstof.

Een groot nadeel van waterstof als brandstof is het feit dat het gasvormig is. Een gasvormige brandstof bevat relatief weinig energie per volume-eenheid en is daarom moeilijk op te slaan of te transporteren.

Een alternatief voor het opslaan van waterstof onder druk is het chemisch binden van waterstof aan een dragermateriaal. Wanneer als drager benzeen of toluen gebruikt wordt is het gehydrogeneerde produkt respectievelijk cyclohexaan of methylcyclohexaan. Deze vloeistoffen zijn onder atmosferische druk op te slaan, bevatten meer (gebonden) waterstof per volume-eenheid en zijn eenvoudiger te vervoeren. Ter vergelijking staan in tabel 1 verschillende manieren voor het opslaan van waterstof weergegeven in energie-inhoud per volume- en gewichtseenheid.

Tabel 1. : Energie-inhoud van verschillende manieren van waterstofopslag.

systeem	energie-inhoud [kWh]		Kcal/kg
	per kg	per l	
gecomprimeerd gas (136 atm)	34.1	0.406	H ₂ C ₂ H ₄ 34000 13000
cryogene vloeistof	34.1	2.387	
metaalhydriden			
ijzertitaan	0.516	3.12	
magnesium	2.555	3.33	
Glass Microspheres	3.921	0.920	
cyclohexaan	2.407	1.874	11.2 / 2000
methylcyclohexaan	2.054	1.584	
{ gasoline (octaan)	12.88	9.048 }	11000

Wat hebben we nu dan?

heating value? lower / higher

$1 \text{ Kcal} = 3,6 \times 10^3 \text{ kJ} = 860 \text{ kcal.}$

$10,000 \text{ kcal/kg} = 11,6 \text{ kWh.}$

Een nadeel van het gebruik van een drager is dat bij het hydrogeneren energie vrijkomt en bij het vrijmaken van de gebonden waterstof energie nodig is. In de afweging waterstof chemisch te binden aan een drager of vrij op te slaan onder druk is dit een belangrijke factor. De manier waarop de vrijgekomen energie gebruikt kan worden en met welk rendement het totale proces bedreven kan worden is dan ook een van de belangrijkste punten van het onderzoek.

In dit fabrieksvoorontwerp wordt het proces beschreven waarin waterstof (HYD) gebonden wordt aan de drager toluen (TOL) waarbij als produkt methylcyclohexaan (MCH) gevormd wordt. Benzeen is minder geschikt als drager dan toluen vanwege de carcinogene eigenschappen.

Het geproduceerde MCH kan op meerdere manieren gebruikt worden.

Een mogelijkheid is om MCH direct te gebruiken als energiedrager voor motoren.

Er zijn systemen ontwikkelt voor de automobiellndustrie waarbij als energiedrager methylcyclohexaan gebruikt wordt (bijv. A. Touzani [1]). Het waterstof wordt katalytisch van de drager gehaald en naar een

verbrandingsmotor geleid. De warmte die vrijkomt bij het verbrandingsproces in de motor kan hiervoor gebruikt worden. De drager wordt opgeslagen in een aparte tank. Nadat de methylcyclohexaan-voorraad is verbruikt kan de drager, toluen, worden verwisseld voor methylcyclohexaan.

Een tweede mogelijkheid is om waterstof te produceren uit MCH in een daarvoor ontworpen fabriek. De principes hiervan zullen ook besproken worden. De gegevens worden echter niet uitgewerkt tot een fabrieksvoorontwerp. Het basisprincipe van de fabriek is hetzelfde als van de hydrogenering, behalve dat er nu warmte ingestopt zal moeten worden. Dit is mogelijk door een klein deel van de geproduceerde waterstof te verbranden in ovens en hiermee de stromen op te warmen.

In de literatuur is gevonden dat er in 1989 plannen gemaakt zijn voor de EURO-QUÉBEC lijn (*J. Gretz [2]*). In dit project wordt 100 MW aan elektrische energie opgewekt door een waterkrachtcentrale en door middel van elektrolyse omgezet in waterstof. Vervolgens wordt deze waterstof aan een dragermateriaal gebonden en verscheept naar Europa, waar het gebruikt wordt voor onder andere : opwekking van elektriciteit/warmte, aandrijving van voer- en vliegtuigen en het verrijken van aardgas met waterstof voor industrieel en huishoudelijk gebruik.

II. UITGANGSPUNTEN VOOR HET ONTWERP.

Voor dit fabrieksvoorontwerp is van dezelfde capaciteit uitgegaan als in de plannen voor de EURO-QUÉBEC lijn.

II.1. UITGANGSPUNTEN VOOR HET HYDROGENERINGSPROCES.

De capaciteit van de hydrogeneringsfabriek is 100 MW. Het aantal bedrijfsuren per jaar is 8000. De opslagcapaciteit wordt hiermee 800 GWh.

Als grondstoffen worden gebruikt:

- toluen (98% toluen, 2% MCH : geschatte samenstelling van de gerecyclede drager), temperatuur 288 K, druk 1 bar.
- waterstof (zuiver verkregen uit elektrolyse en vervolgens tijdelijk opgeslagen bij 12 bar en een temperatuur van 288 K).

Water wordt gebruikt als warmtewisselend medium in de hydrogeneringsfabriek.

Het eindproduct is:

- methylcyclohexaan (98.5% , de verontreinigingen bestaan uit 1.4% toluen en een kleine hoeveelheid opgelost waterstof.), temperatuur 314 K, druk 1 bar.

Om ophoping van inertien te voorkomen moet er een kleine hoeveelheid gespuid worden van de waterstofrecyclestream. Deze spuistroom kan benut worden als stookgas.

II.2. UITGANGSPUNTEN VOOR HET DEHYDROGENERINGSPROCES.

Als grondstof voor dit proces dient methylcyclohexaan. De specificaties zijn op de temperatuur na gelijk aan de produktstroom van de hydrogeneringsfabriek.

De produktstromen van de dehydrogeneringsfabriek zijn toluen en waterstof.

C7H8 + 3H2 <=> C7H16

MCH 12.843 kg/s

Toluene 12.079 kg/s

H₂ 0.765 kg/s

C₇H₈
92

6

0.788 * 0.98 = 0.772

98

reactor 1
voeding

Toluene 0.13 mol/s

H₂ 1.3 mol/s

} to op 1 molair

Recycle 2.442 kg/s
C₁H₉ 1.932 kg/s

II.3. FYSISCHE CONSTANTEN VAN DE GEBRUIKTE STOFFEN.

Tolueen

Kookpunt	384.15 K
Smeltpunt	178.15 K
Vlampunt	277.15 K
Zelfontbrandingstemperatuur	808.15 K
Relatieve dichtheid (water = 1)	0.9
dampspanning bij 293.15 K	29 mbar
relatieve dichtheid bij 293.15 K van verzadigd damp/luchtmengsel (lucht = 1)	1.06
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	3.2
explosiegrensen in lucht	1.2 - 7 vol%

De damp mengt zich goed met lucht zodat er gemakkelijk explosieve mengsels gevormd kunnen worden. Ten gevolge van het geringe geleidingsvermogen van de vloeistof kunnen electrostatische ladingen worden opgewekt bij stroming, beweging enz. Tolueen kan in het lichaam worden opgenomen door inademing en inslikken. Een voor de gezondheid schadelijke concentratie in de lucht kan door verdamping van deze stof bij 20 °C vrij snel worden bereikt; bij vernevelen nog sneller. Tolueen werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. De stof werkt op het zenuwstelsel. In ernstige gevallen is er kans op bewusteloosheid. Na inslikken van de vloeistof kunnen er druppeltjes in de longen terecht komen (aspiratie) waardoor een longontsteking kan optreden. De MAC-waarde is 100 ppm (375 mg/m³).

Methylcyclohexaan

Kookpunt	374	K
Smeltpunt	147	K
Vlampunt	269	K
Zelfontbrandingstemperatuur	531	K
Relatieve dichtheid (water=1)	0.8	
Relatieve dampdichtheid (lucht=1)	3.4	
Dampspanning (20 °C)	48 mbar	
Explosiegrenzen in lucht	1.1 - 6.7	vol%
Minimale ontstekingsenergie	0.27	mJ
MAC-waarde	400 ppm	(1600 mg/m ³)

Methylcyclohexaan werkt prikkelend op de ogen, de huid en de ademhalingsorganen. De vloeistof ontvet de huid. De damp mengt zich goed met lucht zodat er gemakkelijk explosieve mengsels gevormd kunnen worden.

Waterstof

Kookpunt	20 K
Vlampunt	brandbaar gas
Relatieve dampdichtheid (lucht = 1)	0.07
Explosiegrenzen, volume % in lucht	4 - 76

Uit de brede explosiegrenzen blijkt duidelijk dat waterstof zeer brandbaar en explosief is. Bij krachtig uitstromen van waterstof uit een gasfles of in geval van een gaslek kan in de lucht zelfontbranding optreden.

↓
ho maar?

III. BESCHRIJVING VAN DE PROCESSEN.

III.1. BESCHRIJVING VAN HET HYDROGENERINGSPROCES.

III.1.1. Algemeen.

Een belangrijk uitgangspunt voor het ontwerp is het zo goed mogelijk benutten van de energie die vrijkomt bij de hydrogenering van toluen. Daarom wordt de warmte die vrijkomt zoveel mogelijk in het proces gebruikt en voor de rest in medium pressure steam omgezet. De opgewekte stoom kan omgezet worden in elektrische energie.

De opzet van het ontwerp is weer te geven in een versimpeld schema zoals afgebeeld in figuur 1.

Toluen en waterstof worden in zes in serie geplaatste adiabatise reaktoren omgezet in methylcyclohexaan. Tussen de reaktoren zijn warmtewisselaars geplaatst om het mengsel op de geschikte reaktietemperatuur te brengen. In het proces wordt een overmaat waterstof gebruikt. De overmaat is gunstig voor de ligging van het evenwicht en voorkomt koolafzetting op de katalysator. Het produkt kan eenvoudig gescheiden worden van de waterstof met behulp van een fasenscheider. De warmte die vrijkomt in het proces wordt voor een deel gebruikt voor het op reaktietemperatuur brengen van de grondstoffen. De overige warmte wordt gebruikt voor het opwekken van stoom. De energie die deze stoom bezit wordt omgezet in elektrische energie. Dit staat schematisch weergegeven in figuur 2.

III.1.2 Beschrijving Hydrogeneringssectie.

Stroomnummers staan tussen vierkante haakjes en apparaatnummers tussen ronde.

De beschrijving vindt plaats aan de hand van het processchema. Het proces vindt plaats bij een druk van 22 bar. Om toluen [1] op 22 bar te brengen wordt gebruik gemaakt van pomp (P1). De voorraad toluen is opgeslagen bij atmosferische druk en een temperatuur van vijftien graden celcius.

Het waterstof [2] wordt met compressor (C5) op druk gebracht. Van waterstof is verondersteld dat het afkomstig is van een nabij gelegen installatie waar het geproduceerd wordt. Hierdoor is voor een tijdelijke opslag gekozen bij vijftien graden celcius onder een relatief lage druk van 12 bar.

Vervolgens wordt de toluen-stroom [3] verdampt. Daarvoor wordt gebruik gemaakt van een warmtewisselaar (H2) en twee verdampers (H3) en (H4) in serie. Op deze manier kan beter gebruik gemaakt worden van de beschikbare hoeveelheid warmte uit het proces. De toluen wordt in (H4) oververhit om te voorkomen dat er vloeistof ontstaat nadat de waterstof- [7] en de toluenstroom [6] bijelkaar komen. Het mengsel [8] wordt vervolgens op reaktietemperatuur gebracht met behulp van warmtewisselaar (H6).

Het reaktorgedeelte bestaat uit zes adiabatise katalysator-bedden in serie. Tussen elk katalysator-bed zijn een of meer warmtewisselaars geplaatst om het reaktiemengsel weer op reaktietemperatuur te brengen.

De warmte, die uit het mengsel [10] gehaald wordt na het eerste katalysator-bed (R7), wordt voor een deel gebruikt in verdamper (H4) voor het verdampen van de toluen-voeding [5]. Het andere deel wordt gebruikt in stoomgenerator (H8) voor het opwekken van medium pressure steam. De warmte, die uit het reaktiemengsel [13] gehaald wordt na het tweede katalysatorbed (R9), wordt in het geheel gebruikt in verdamper (H3) voor het verdampen van de toluen-voeding [4]. De warmte, die uit de reaktiemengsels [15], [17] en [19] gehaald wordt na de derde (R10), vierde (R12) en vijfde reaktor (R14), wordt in het

Kan niet zijn, erg laag, wordt daarna ook verdampt!

Waarom?

geheel gebruikt in de stoomgeneratoren (H11), (H13) en (H15) voor het opwekken van medium pressure steam.

Na de reactorsectie moet het mengsel [21] gescheiden worden. Het mengsel wordt eerst gedeeltelijk gecondenseerd.

Dit gebeurt door middel van een warmtewisselaar en drie condensors in serie.

De warmte die met behulp van warmtewisselaar (H6) uit de processtroom [21] gehaald wordt, wordt gebruikt voor het opwarmen van het reaktiemengsel [8] voor de eerste reaktor (R7). De eerste condensor (H2) geeft zijn warmte af aan de toluen voeding [3]. Energie van stroom [23] wordt in de tweede condensor (H17) gebruikt voor het opwekken van medium pressure steam. De derde condensor (H18) geeft de warmte van stroom [24] af aan koelwater. Het mengsel wordt in deze condensor bovendien ongeveer 10 graden onderkoeld. In fase-scheider (V19) wordt de gasfase van de vloeistoffase gescheiden. Vervolgens wordt de vloeistofstroom [26] uit fase-scheider (V19) geflasht van 22 bar tot atmosferische druk in flash-vat (V21). De vloeistofstroom [27] uit de flash is de produktstroom. Deze bestaat voor 98.5 % uit methylcyclohexaan. De verontreinigingen zijn toluen en waterstof. Het produkt heeft een temperatuur van ongeveer achtendertig graden celcius en een druk van 1 bar.

De gasstroom [30] uit de flash wordt weer met compressor (C20) op druk gebracht en samen met de gasstroom [29] uit fase-scheider (V19) gerecycled [32]. Al naar gelang de zuiverheid van de waterstofvoeding [2] zal een klein gedeelte van recyclestroom [32] gespuid moeten worden. De hoeveelheid hangt af van de zuiverheid.

III.1.3. Procesregeling Hydrogeneringssectie.

In het proces worden de debieten van de waterstofvoeding [7], de toluen voeding [2] en de recycle stroom [32] gemeten. De recycle stroom bestaat uit waterstof met mogelijk een kleine hoeveelheid inert materiaal wat het proces is binnengekomen als vervuiling van de waterstofvoeding [2]. Omdat temperatuur, druk en samenstelling van de stromen bekend zijn kan uit het massa debiet het debiet in grammol per seconde berekend worden. Aan de hand van het debiet van de recyclestroom kunnen de voedingsstromen aangepast worden. Omdat de debieten van de toluen voeding en de waterstofvoeding afzonderlijk bekend zijn is het mogelijk te bepalen of bij een verstoring in de recyclestroom de toluen voeding of de waterstofvoeding aangepast moet worden. Met behulp van de waarde van het debiet van de produktstroom kunnen de waarden van de overige debieten gecontroleerd of lekkages geconstateerd worden.

Om het proces voldoende te kunnen controleren worden de temperaturen stromen uit de reaktoren gemeten.

Dit zijn de stromen [10], [13], [15], [17], [19] en [21]. Deze temperaturen zijn van belang voor het behalen van een goede conversie en dus voor de zuiverheid van het produkt. De temperaturen van de voedingsstromen van vier van de zes reaktoren worden bepaald door de hoeveelheid geproduceerd medium pressure steam en zijn dus regelbaar.

Het proces wordt op druk gehouden door twee compressoren. De ingangstemperatuur van de fasenscheider wordt geregeld door het aanpassen van de hoeveelheid koelwater door de warmtewisselaar. In de fasenscheider en in de flash zijn niveauregelaars in gebouwd.



Neer.
Laan H₂ vredey!

III.1.4. Steamplant.

De opgewekte medium pressure steam wordt gebruikt voor het opwekken van elektrische energie. In figuur 2 staat een blokschema waarin de stoom-kringloop wordt weergegeven.

Het water wordt verwarmd door het in tegenstroom in contact te brengen met de produktstroom uit de zesde reaktor. Het water wordt dan in vier parallel geplaatste verdampers verdampt en verhit tot ongeveer 525 K met een druk van 12 bar. De stoom wordt vervolgens door een turbine geleid, gecondenseerd en gekoeld tot 313 K bij een druk van 0.1 bar. Het water wordt dan weer verpompt naar de warmtewisselaar. De turbine is aangesloten op een generator waarmee elektrische energie wordt opgewekt.

III.1.5. Flexibiliteit van het Proces.

Het is mogelijk het proces op een lager produktieniveau te bedrijven dan waarvoor het ontworpen is. Door de verminderde doorzet zal er in de warmtewisselaars minder energie overgedragen worden. Het warmte uitwisselend oppervlak blijft echter gelijk waardoor de temperaturen van de verschillende stromen zullen veranderen. Doordat het reaktiemengsel op een andere temperatuur in het reaktor-gedeelte komt zal er geen optimaal gebruik worden gemaakt van het beschikbare reaktorvolume. Bij een kleinere doorzet is de verblijftijd in de adiabatische bedden echter groter. Door deze overmaat aan reaktorvolume hoeft het inefficiënt gebruik maken van het reaktorvolume niet te leiden tot een lagere conversie. Bovendien kunnen de ingangstemperaturen van 4 adiabatische bedden geregeld worden door het aanpassen van de produktie van medium pressure steam. De temperatuur in de eerste fasenscheider wordt geregeld door het aanpassen van de hoeveelheid koelwater.

III.1.6. Inbedrijfstelling.

De reaktoren dienen eerst op reactie temperatuur gebracht te worden. Vervolgens wordt het systeem gevuld met waterstof en op druk gebracht. Door in een van de reaktoren toluen te vernevelen zal de reactie opgang komen. De warmte die hierbij vrijkomt kan dan gebruikt worden voor het verdampen en op reaktietemperatuur brengen van een gedeelte van de toluen voeding. Wanneer de voedingsstroom groot genoeg is kan het vernevelen gestopt worden en kan het proces op produktieniveau gebracht worden. Het tijdens het opstarten geproduceerde methylcyclohexaan wat niet aan de specificaties voldoet kan eventueel in kleine hoeveelheden met de toluen voeding worden opgemengd wanneer het proces in bedrijf is.

*Warmte -
wisseling
heer of slechter?*

hoe?

*Niet!
No.*

III.2. BESCHRIJVING VAN HET DEHYDROGENERINGSPROCES.

In tegenstelling tot het hydrogeneringsproces is het dehydrogeneringsproces niet uitgewerkt tot een fabrieksvoorontwerp. Daarom wordt van dit proces alleen een algemene beschrijving gegeven.

III.2.1. Algemeen.

De opzet van het ontwerp is hetzelfde als bij de hydrogenering. *→ vrg laag.* Figuur 3 geeft een versimpeld schema van het proces. Het proces vindt plaats bij een druk van 5 bar. Het op druk brengen van de methylcyclohexaan gebeurt met een pomp. De vijfvoudige overmaat waterstof komt uit het proces en is dus reeds op druk. Het methylcyclohexaan wordt verdampt door warmte uit te wisselen met de stroom uit de laatste reaktor. Het opwarmen van de beginstroom (waterstof + MCH) gebeurt met een oven. *p te kat*

Het reaktorgedeelte bestaat uit een vijf- tot zestal adiabatische katalysatorbedden in serie. Tussen elk bed is een oven geplaatst om het reaktiemengsel weer op te warmen. *t = 1000 of*

De enige terugwinning van warmte in het proces is een warmtewisselaar om de beginstroom op te warmen met de stroom uit de laatste reaktor.

Om de producten toluen en waterstof van elkaar te scheiden wordt er eerst afgekoeld tot kamertemperatuur bij gelijkblijvende druk (om de grootte van de warmtewisselaar te beperken) waarbij de producten van elkaar gescheiden worden. De waterstof wordt gedeeltelijk op druk gebracht (12 bar voor tijdelijke opslag) en een ander deel gaat terug het proces in. De toluen wordt opgeslagen onder atmosferische druk.

III.2.2. Procesregeling Dehydrogeneringssectie.

Het debiet van de recycle-stroom waterstof zal gemeten en gecontroleerd worden voor het behoud van een vijfvoudige overmaat ten opzichte van MCH. De stroom MCH zal tevens worden gemeten en geregeld zodat beide stromen op elkaar afgestemd zijn.

Om de ingangstemperaturen van de reaktoren te kunnen regelen zal deze gemeten worden en hiermee zal de hoeveelheid waterstof die in de ovens verbrand wordt, worden geregeld.

In de condensor is een niveauregelaar aanwezig. *kan nou...*

III.2.3. Flexibiliteit van het proces

Het is goed mogelijk het proces op een lager produktieniveau te bedrijven dan waarvoor het ontworpen is. Door de verminderde doorzet zullen de ovens op een lagere capaciteit moeten gaan werken. De reaktoren zijn in dit geval overgedimensioneerd, waardoor de reaktiemengsels iets meer op evenwicht komen. Hierdoor zal zelfs een iets hogere conversie gehaald kunnen worden. Verder hebben de stromen nauwelijks interacties met elkaar, waardoor problemen zouden kunnen ontstaan.

Hogere produktieniveaus zijn niet haalbaar. Dit zou leiden tot een te lage conversie.

III.2.4. Inbedrijfstelling.

Het systeem wordt volgepompt met waterstof, dat door de ovens opgewarmd wordt tot circa 700 K. Deze waterstof wordt rondgepompt totdat alle katalysatorbedden voldoende opgewarmd zijn. Dat dit gebeurt met waterstof is nodig om geen inert in het systeem te krijgen en zo is men zeker van een overmaat waterstof aan het begin van de inbedrijfstelling.

Vervolgens wordt de methylcyclohexaan geïntroduceerd, waarna de condensor gestart wordt. Het proces kan nu op volle capaciteit in bedrijf worden gebracht.

IV. PROCESKONDITIONES.

IV.1. PROCESKONDITIONES VAN HET HYDROGENERINGSproces.

Voor het doorrekenen van het proces werd gebruik gemaakt van het sequentieel flowsheeting-programma CHEMCAD.

IV.1.1. Thermodynamica en oplosbaarheid:

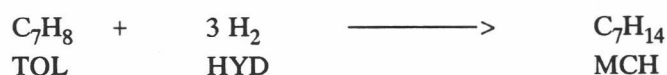
In het flowsheeting-programma CHEMCAD werd voor het schatten van de thermodynamische eigenschappen van de stoffen en mengsels gebruik gemaakt van de Soave-Redlich-Kwong (SRK) toestandsvergelijking. Het proces vindt voornamelijk plaats in de gasfase. De SRK-toestandsvergelijking is bij hogere drukken voor koolwaterstoffen binnen 1 à 2 procent nauwkeurig. Er moet rekening gehouden worden met het feit dat de kritische temperaturen van toluen en methylcyclohexaan binnen het temperatuurgebied vallen waarin het proces plaatsvindt. Wanneer de kritische temperatuur ongeveer gelijk is aan de temperatuur van het systeem kunnen de fouten groter zijn. Voor het berekenen van de vloeistofdichtheden is gebruik gemaakt van een andere methode (API) omdat een toestandsvergelijking hiervoor niet geschikt is.

Bij het condenseren van de productstroom voor het verwijderen van het methylcyclohexaan is nog gekeken naar het gebruik van Henry-coëfficiënten voor het oplossen van waterstof in de productstroom. Hierbij trad echter geen noemenswaardig verschil op met het gebruik van het SRK - model, zodat deze laatste voor het gehele proces gebruikt is.

Voor de warmtecapaciteiten van de verschillende stromen is bij de handmatige berekeningen gebruik gemaakt van gegevens uit *R.K. Sinnott [3]*, bij de berekeningen met CHEMCAD van de hierbij aanwezige databank.

IV.1.2. Reaktiewarmte.

De reaktiewarmte van de reactie:



bedraagt - 204,646 kJ/(mol toluen) onder standaardcondities (temperatuur 298 K en 1 atmosfeer druk). Andere reacties doen zich in het systeem niet voor.

IV.1.3. Reactie-evenwicht.

De temperatuursafhankelijkheid van evenwichtsconstante (K_{eq}) van de reactie kan in het betreffende temperatuurgebied beschreven worden met de formule:

$$K_{eq} = A \cdot \exp\left(-\frac{\Delta H_r}{R \cdot T}\right)$$

$$\ln \frac{K_2}{K_1} = \frac{\Delta H_r^\circ}{R} \left[\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right] \quad (1)$$

waarin: K_{eq} = evenwichtsconstante [kPa^3]
 A = pre-exponentiële factor [kPa^3]
 ΔH_r = reactie-enthalpie [J/mol]
 R = gasconstante [J/(mol.K)]
 T = temperatuur [K]

De evenwichtsconstante is hierbij gedefinieerd als:

$$K_{eq} = \frac{P_{TOL} \cdot P_{HYD}^3}{P_{MCH}}$$

$$K_p = K_c P^{\Delta N} \quad (2)$$

$$= K_c P^3$$

waarin: P_{HYD} = partiaalspanning waterstof [kPa]
 P_{TOL} = partiaalspanning toluen [kPa]
 P_{MCH} = partiaalspanning methylcyclohexaan [kPa]

Voor de pre-exponentiële factor en de reactie-enthalpie in formule 2 zijn vier verschillende getallenparen in de literatuur gevonden:

	A [kPa^3]	ΔH_r [J/mol]
- O. Sultan, M. Shaw [4]	$4,05 \cdot 10^{26}$	$216,35 \cdot 10^3$
- L.E. Faith e.a. [5]	$4,16 \cdot 10^{26}$	$215,18 \cdot 10^3$
- J. Akyurtlu, E. Stewart [6]	$1,12 \cdot 10^{27}$	$216,35 \cdot 10^3$
- T.K. Rimensberger [7]	$6,07 \cdot 10^{26}$	$216,35 \cdot 10^3$

De vier bovenstaande getallenparen werden alle vier experimenteel getest door T.K. Rimensberger [7]. Het bleek dat de constanten bepaald door J. Akyurtlu en E. Stewart [6] het beste de gevonden evenwichten beschreven en deze werden dan verder ook aangenomen.

IV.1.4. Katalysator en reactiekinetiek.

Er zijn verschillende stukken in de literatuur gevonden over de kinetiek van de hydrogenering van toluen:

- *L.M. Marnaladze e.a.[8]*: hydrogenering over een nikkel op zinkoxide katalysator.
- *N. Ganesh Karanth e.a.[9]*: hydrogenering over nikkel op silica katalysator.
- *D. Klvana e.a.[10]*: hydrogenering over een nikkel op silica-aerogel.

In alle bovenstaande artikelen is het temperatuurgebied laag (90-200 °C) en zijn de metingen verricht bij atmosferische druk. Bij gebrek aan beter is voor het modelleren van de reactoren gebruik gemaakt van de katalysator en de kinetiek-vergelijking van *D. Klvana, e.a.[10]*, vooral omdat hier de temperatuur-invloed goMw beschreven is.

De katalysator is een nikkel op silica-aerogel met een specifiek oppervlak van 620 m²/g en een schijnbare dichtheid van 10 kg/m³.

De gebruikte kinetiek-vergelijking luidt:

$$r = \frac{82.152}{60} \cdot \frac{P_{tot}^o}{P_{tol}^o} \exp\left(-\frac{5622}{T}\right) \quad (3)$$

waarin: r = reactiesnelheid [mol/(g.s)]
 P_{tot}^o = druk ingaande stroom [kPa]
 P_{tol}^o = dampspanning tol ingaande stroom [kPa]
 T = temperatuur [K]

Omdat de katalysator in een hoger temperatuurgebied gebruikt zal worden, moet worden gekeken naar het chemisch evenwicht en het effect van de temperatuur hierop.

De reactiekinetiek zoals vermeldt in formule 1 wordt nu aangepast voor het gebruik in hogere temperatuurgebieden, waar het chemisch evenwicht reeds mee gaat spelen. Hiertoe wordt formule 1 vermenigvuldigd met:

$$\left(1 - \frac{K_{eq} \cdot P_{MCH}}{P_{TOL} \cdot P_{HYD}^3}\right) \quad (4)$$

waardoor de uiteindelijk gebruikte reactie-snelheidsvergelijking de volgende is:

$$r = \frac{82.152}{60} \cdot \frac{P_{tot}^o}{P_{TOL}^o} \cdot \exp\left(-\frac{5622}{T}\right) \cdot \left(1 - \frac{K_{eq} \cdot P_{MCH}}{P_{TOL} \cdot P_{HYD}^3}\right) \quad (5)$$

De verschillende partiëlespanningen in formule 5 zijn te berekenen met de volgende formules, waarin deze een functie zijn van de conversie en de ingangscondities:

$$P_{TOL} = P_{TOL}^{\circ} \cdot \frac{1-X}{\epsilon \cdot X+1} \quad (6)$$

$$P_{HYD} = \frac{P_{HYD}^{\circ} - 3 \cdot X \cdot P_{TOL}^{\circ}}{\epsilon \cdot X+1} \quad (7)$$

$$P_{MCH} = \frac{P_{MCH}^{\circ} + X \cdot P_{TOL}^{\circ}}{\epsilon \cdot X+1} \quad (8)$$

waarin: X = conversie [-]

ϵ = fractie volumeverandering bij reactie [-]

zodat de reactiesnelheid geheel als functie van conversie, ingangscondities en temperatuur geschreven kan worden.

Er is gekozen voor een tienvoudige overmaat waterstof in het reaktiemengsel ten opzichte van toluen. Dit is in de eerste plaats gunstig voor het evenwicht en is tevens nodig om coke-afzetting op de katalysator te voorkomen.

?

Maak
maat of niet?

IV.1.5. Druk en temperatuur.

Het proces wordt bedreven op een druk van 22 bar. Het gehele reaktorgedeelte van het proces (reactoren met warmtewisselaars) wordt bedreven op een temperatuur tussen 550 en 670 K. Onder deze omstandigheden zijn de mengsels van grondstoffen en eindproduct gasvormig. Een lagere druk betekent een andere ligging van het evenwicht. Dit heeft gevolgen voor de temperaturen waarop het proces bedreven moet worden: deze moeten omlaag. De temperatuur heeft invloed op de reactiesnelheid, wat gevolgen heeft voor het reaktorvolume. Een hogere druk in het systeem vereist hogere reaktietemperaturen. Dit heeft een positief effect op het benodigde reaktorvolume maar een negatief effect op de levensduur van de katalysator. Op grond van de bovenstaande effecten is de druk van 22 bar gekozen. In de figuren 4, 5 en 6 wordt de ligging van het evenwicht en verschillende reactiesnelheden weergegeven als functie van de samenstelling van het reaktiemengsel (conversie) en de temperatuur, bij de drukken 11 bar, 22 bar en 33 bar.

?

Om het gevormde methylcyclohexaan af te scheiden van de overmaat waterstof zal de eindstroom afgekoeld worden tot ongeveer 40 °C.

IV.2. PROCESKONDITIONS VAN HET DEHYDROGENERINGSproces.

IV.2.1. Thermodynamica en oplosbaarheid.

De opmerkingen die gemaakt zijn over thermodynamica en oplosbaarheid bij de hydrogenering van toluen, zijn ook geldig voor de dehydrogenering van methylcyclohexaan. Hoewel het dehydrogenerings proces op een lager drukkiveau bedreven wordt dan het hydrogenerings proces, biedt de SRK-toestandvergelijking de beste mogelijkheden voor het schatten van de thermodynamische eigenschappen.

IV.2.2. Reaktiewarmte.

De dehydrogenerings reactie is endotherm. De reaktiewarmte bedraagt 204.646 kJ/(mol MCH). Andere reacties doen zich in het systeem niet voor.

IV.2.3. Reactie-evenwicht.

De formules die het evenwicht beschrijven zijn al genoemd in hoofdstuk IV.1.3. Er dient rekening gehouden te worden met het feit dat de reaktiewarmtes voor hydrogeneratie en dehydrogeneratie tegengesteld zijn in teken en de wijze waarop de evenwichtsconstante gedefinieerd wordt (formule 2).

↑
Waarom niet
216
(zie blz 12)

IV.2.4. Katalysator en reactiekinetiek.

Er zijn verschillende stukken in de literatuur gevonden over de kinetiek van de dehydrogenering van MCH:

- *J.H. Sinfelt e.a.[11]*: dehydrogenering over een platina op alumina katalysator.
- *A. Touzani e.a.[12]*: dehydrogenering over een platina op alumina katalysator.
- *K. Jothimurugesan [13]*: dehydrogenering over een platina-rhenium op aluminakatalysator.

De metingen in het stuk van *J.H. Sinfelt, e.a.[11]* zijn uitgevoerd in een beperkt temperatuursgebied (tussen 590 en 645 K) en voor lage ingangsdrukken MCH en HYD. De andere twee zijn algemener geldig. Uit het stuk van *K. Jothimurugesan [13]* blijkt dat de platina-rhenium katalysator een goede activiteit heeft en minder deactivering vertoont tijdens gebruik dan een platina-katalysator. Om deze reden is de platina-rhenium-katalysator te verkiezen boven een platina-katalysator.

De platina-rhenium op alumina katalysator heeft een samenstelling van 0,3 gew% platina en 0,3 gew% rhenium. Het specifiek oppervlak is 220 m²/g.

De gebruikte kinetiekvergelijking luidt:

$$r = k \cdot \frac{(P_{MCH} - \frac{P_{TOL} P_{HYD}^3}{K_{eq}})}{1 + K_T P_{TOL}}$$

(9)

$$k = 3.745 \cdot 10^{-3} \exp\left(-\frac{6200}{T}\right)$$

$$K_T = 6.25 \cdot 10^{-4} \exp\left(\frac{1600}{T}\right)$$

waarin: r = reactiesnelheid [mol/(g.s)]
 k = reactiesnelheidsconstante [mol/(g.s.kPa)]
 K_T = toluen-absorptieconstante [kPa⁻¹]

In deze kinetiek-vergelijking is het chemisch evenwicht reeds verwerkt, op dezelfde manier als bij de hydrogenering. Er is gekozen voor een vijfvoudige overmaat waterstof ten opzichte van MCH om coke-vorming op de katalysator te voorkomen.

IV.2.5. Druk en temperatuur.

Voor de bepaling van de procesdruk en de reactietemperatuur van de dehydrogenering van methylcyclohexaan geldt een soortgelijke redenering als voor de hydrogenering van toluen. Een lage druk heeft een positief effect op het evenwicht maar een negatief effect op het benodigde reaktorvolume. Een hoge druk heeft in beginsel een positief effect op het benodigde reaktorvolume maar door de invloed op het evenwicht wordt dit geheel teniet gedaan. Een hoge temperatuur is gunstig voor de optredende reactiesnelheden en de ligging van het evenwicht (endotherme reactie) maar ongunstig voor de levensduur van de gebruikte katalysator. De reactietemperatuur moet dus een zodanige waarde hebben dat er geen sintering en geen coke-vorming optreedt, en de reactie voldoende snel verloopt. De maximaal toelaatbare temperatuur wordt daardoor circa 750 K, terwijl de minimale temperatuur ongeveer 600 K bedraagt. Het gehele reaktorgedeelte (adiabatische bedden en ovens) wordt bedreven op een druk van 5 bar en een temperatuur tussen 750 en 600 K. Onder deze omstandigheden zijn de grondstof en alle producten gasvormig.

Om het gevormde toluen af te scheiden van de gevormde waterstof zal de eindstroom afgekoeld worden tot ongeveer 40 °C. De waterstof wordt op een druk van 12 bar gebracht voor tijdelijke opslag.

A
 waarom
 nu maar 5.

Waarom

520°C
 moet kunnen.

330
 H₂/oil → 4.
 P/H₂
 minimum CLR
 WOP per reference
 niet kt op 5 bar
 abt.

V. APPARATUURKEUZE EN BEREKENING.

In dit hoofdstuk worden de keuzes en de berekeningen die betrekking hebben op de apparaten uit het processchema nader uitgewerkt. Omdat van het dehydrogeneringsproces geen processchema gemaakt is, zijn de toelichtingen voor dit proces kwalitatief van aard.

V.1. HYDROGENERINGSPROCES.

V.1.1. Reactoren.

De hydrogeneringsreactie is exotherm. Door de grootte van de reaktiewarmte zal er gekoeld moeten worden tijdens de reactie. Er zijn twee mogelijkheden om de reaktiewarmte af te voeren.

- Een gekoelde pijpenreaktor, waar de reactie plaatsvindt binnenin een pijpenbundel waarlangs aan de buitenkant een koelmiddel stroomt.

- Een reaktorsessie bestaande uit adiabatiscche bedden afgewisseld met warmtewisselaars.

Theoretisch is een gekoelde pijpenreaktor beter omdat er een temperatuurprofiel opgelegd kan worden, zodanig dat de reaktiesnelheid altijd maximaal is bij een bepaalde conversie (zie de stippellijn in figuur 7). De reaktiesnelheid neemt namelijk bij oplopende temperatuur toe, totdat het evenwicht een rol begint te spelen en de reaktiesnelheid hierdoor afneemt.

In de praktijk is de reactie echter zó exotherm dat het onmogelijk is het gewenste temperatuurprofiel over de lengte van de buis te realiseren. Er zullen grote temperatuurgradiënten ontstaan over de buisdiameter, waarbij het midden van de buis een relatief hoge temperatuur krijgt.

Bij het gebruik van een cascade van adiabatiscche bedden en warmtewisselaars in serie zijn er geen grote temperatuurgradiënten over de buisdiameter waardoor het systeem eenvoudiger te processen is. Het mengsel warmt in de adiabatiscche bedreaktor op door de plaatsvindende reactie totdat de reaktiesnelheid scherp daalt door het naderen van het evenwicht. Daarna wordt het mengsel afgekoeld in een warmtewisselaar en in de volgende reaktor geleid. Afhankelijk van het aantal bedden, de ingangstemperaturen van de reaktanten en de reaktorvolumes kan op deze wijze het temperatuurprofiel van de ideale gekoelde pijpenreaktor meer of minder benaderd worden.

Aan de hand van de genoemde overwegingen hebben de adiabatiscche bedden in serie de voorkeur boven een gekoelde pijpenreaktor.

Voor het dimensioneren van de adiabatiscche bedden is onder andere gebruik gemaakt van een methode voorgesteld door *R. Aris* [14]. De gevolgde procedure kan weergegeven worden in een figuur soortgelijk aan figuur 7. In dit figuur zijn als functie van de conversie en de temperatuur lijnen weergegeven die een bepaalde reaktiesnelheid aangeven. In dit figuur kunnen tevens lijnen weergegeven worden die het verband aan geven tussen de temperatuur en de conversie. Op deze manier kan een traject zoals in figuur 8 afgeleid worden.

Het verband tussen conversie en temperatuur in de adiabatische bedden luidt:

$$X = \frac{\int_{T_0}^T \sum \Theta_i C_{P_i} dT}{-\Delta H_r(T)} \quad (10)$$

waarin: T_0 = ingangstemperatuur [K]
 Θ_i = voedingsverhouding stof i - stof waarop conversie is gedefinieerd
 C_{P_i} = warmtecapaciteit stof i [J/(mol.K)]
 ΔH_r = reaktiewarmte op temperatuur T [J/mol]

Voor de reaktiewarmte op temperatuur T geldt:

$$\Delta H_r(T) = \Delta H_r^0(T_r) + \int_{T_r}^T \Delta C_p dT \quad (11)$$

waarin: T_r = referentietemperatuur voor ΔH_r
 ΔC_p = verandering in warmtecapaciteit door de reactie

Omdat de warmtecapaciteiten als polynomen weergegeven worden, zijn de integralen simpel uit te werken. Om de verschillende lijnen van X tegen T uit te rekenen is een PASCAL-programma geschreven (zie bijlage 2). Tevens is er een programma geschreven dat de punten van een curve met gelijke reaktiesnelheid berekent (zie bijlage 3).

Om de verschillende reaktoren door te rekenen is als volgt te werk gegaan:

- Er is als eerste een volledige figuur gemaakt met daarin de verschillende curves voor gelijke reaktiesnelheid en de lijnen van de conversie tegen de temperatuur om een algemene indruk te krijgen van het verloop van conversie tegen temperatuur en het aantal te gebruiken bedden (zie figuur 9).
- Aangezien de verschillende lijnen van X tegen T nagenoeg recht zijn, zijn deze benaderd met een rechte lijn door deze te fitten met het programma *RRGRAPH* [15]. Hierbij is de temperatuur als functie van de conversie bepaald.
- De differentiaalvergelijking voor een adiabatische buis is opgesteld en luidt:

$$\frac{dX}{dV} = - \frac{r_{TOL}}{\Phi_{TOL_0}} \quad (12)$$

waarin: V = volume reaktor [m³]
 Φ_{TOL_0} = ingaande stroom toluen [mol/s]
 r_{TOL} = reaktiesnelheid [mol/(m³.s)]

De reaktiesnelheid (r) is een functie van de conversie en de temperatuur (zie formule 5, 6, 7 en 8). Door echter een gefitte lijn van X tegen T in te vullen wordt r alleen een functie van X en kan de differentiaalvergelijking opgelost worden.

- Er is vervolgens een programma geschreven met toepassing van het pakket *RKPACK* [16] om een buisreaktor door te rekenen (zie bijlage 4). Het programma optimaliseert de ingangstemperatuur en berekent de uitgangconversie en temperatuur. Het optimaliseren is mogelijk doordat alle lijnen van T als functie van X erin verwerkt zijn en hiertussen geïnterpoleerd kan worden.

- Met behulp van bovengenoemd programma zijn de volgende reaktoren berekend:

Reaktor	Volume [m ³]	X _{in} [-]	X _{uit} [-]	T _{in} [-]	T _{uit} [-]
1	3	0.057	0.316	551.1	665.0
2	2	0.316	0.498	575.3	656.4
3	2	0.498	0.664	568.0	642.1
4	2	0.664	0.797	575.5	635.1
5	2	0.797	0.911	568.3	620.3
6	1.5	0.911	0.986	552.4	587.6

Voor het bereiken van conversies hoger dan 98 - 99 % zijn de benodigde reaktorvolume onevenredig groot.

In de berekeningen in CHEMCAD worden de reaktoren alleen gedefinieerd op basis van deze conversies. De uitgaande temperaturen komen goed overeen met de hierboven berekende waarden.

V.1.2. Warmtewisselaars

Door de grote warmteverschillen over de warmtewisselaars en de hoge druk in tubes en shell, is het niet mogelijk om fixed tubes te nemen. Er is daarom gekozen voor een floating head type warmtewisselaar, met een external floating head om de ruimte tussen de pijpenbundel en de shell te minimaliseren.

Voor het schatten van de warmte-overdrachtscoëfficiënten en drukvallen is gebruik gemaakt van gegevens en methoden, zoals vermeldt in *R.K. Sinnott* [3].

Er zijn vier soorten warmtewisselaars in de fabriek aanwezig:

- Watervdampers voor de stoomgeneratie. De stromen zijn aan de ene kant heet procesgas en aan de andere kant water en stoom.
- Opwarmers van de beginstromen, tegelijkertijd koelers voor de eindstroom of een stroom tussen twee reaktoren.
- Een koeler van de eindstroom, tegelijkertijd een voorverwarmer voor het water in de stoom-plant.
- Een koeler voor het verwijderen van de restwarmte die de produktstroom nog bevat, om deze op een geschikte opslagtemperatuur te krijgen en een koeler voor het condenseren van de stoom in de stoom-plant.

Deze vier soorten zullen nu achtereenvolgens behandeld worden.

-Watervdampers: Dit zijn verticaal geplaatste verdampers met het verdampende water aan de shell-zijde en de gasstroom aan de tube-zijde. De warmte-overdrachtscoëfficiënt (h) is geschat op 170 W/(m².K). Dat deze warmte-overdracht zo laag is komt door de lage h aan de gaszijde (200 W/(m².K)). Voor een voorbeeld-berekening van afmetingen en drukval zie bijlage 5 Voor andere watervdampers zie specificatiebladen, hoofdstuk VII.

-Opwarmers/afkoelers: Als de beginstromen nog vloeibaar zijn, zijn het horizontale warmtewisselaars; bij het verdampen verticale, met de beginstromen aan de shell-zijde.

De warmtewisselaars waarin beide stromen gasvormig zijn, worden erg groot, doordat de warmteoverdracht klein wordt (circa $100 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$) en de volumestromen aan beide zijden erg groot zijn. Voor een voorbeeldberekening van afmetingen en drukval zie bijlage 6. Voor de andere warmtewisselaars zie specificatiebladen, hoofdstuk VII.

-De koeler van de eindstroom kan niet alle warmte verwijderen omdat het koelmedium (water uit de stoom-plant) al een temperatuur van circa $40 \text{ }^\circ\text{C}$ heeft.

-Koelers voor verwijderen restwarmte: Hierbij wordt met koelwater gewerkt dat op $20 \text{ }^\circ\text{C}$ binnenkomt en de warmtewisselaars met maximaal $32 \text{ }^\circ\text{C}$ weer verlaat (om ketelsteenvorming zo veel mogelijk tegen te gaan). Voor een voorbeeldberekening zie bijlage 7; zie verder specificatiebladen, hoofdstuk VII.

V.1.3. Fasenscheidingen:

Er worden twee fasenscheidingen uitgevoerd met de produktstroom, die door middel van flashes gesimuleerd zijn.

De eerste vind plaats door de produktstroom af te koelen tot circa $37 \text{ }^\circ\text{C}$ bij gelijkblijvende druk van 22 bar. Dit afkoelen wordt eerst bij deze hoge druk gedaan om de warmtewisselaars kleiner te houden en compressiekosten uit te sparen.

Het condensaat wordt vervolgens geflasht naar atmosferische druk. Het beetje gas dat hierbij vrijkomt wordt weer op druk gebracht en gerecycled.

Het eerste flashvat is gedimensioneerd met behulp van de methode gegeven in *Coulson and Richardson* [3]. Er is gekozen voor een verticaal vat omdat de voedingsstroom voor een groot gedeelte uit gas bestaat. Met behulp van formule 13 wordt de maximale dampnelheid berekend.

$$U_v = 0.035 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_v}} \quad (13)$$

waarin: U_v = dampnelheid [m/s]
 ρ_v = dichtheid gasfase [kg/m^3]
 ρ_l = dichtheid vloeistoffase [kg/m^3]

Met de dampstroom en de dampnelheid kan de doorsnede van het vat bepaald worden. De hoogte van de gaskap is gelijk aan de diameter. Voor de vloeistof wordt een verblijftijd van 5 minuten aangehouden.

Het tweede flashvat wordt berekend volgens een methode gegeven door Evans [22]. Dit is een horizontaal vat omdat de voeding voor het grootste gedeelte uit vloeistof bestaat. Er is gebruik gemaakt van een monogram (opgenomen in bijlage 8). Er is gekozen voor een vloeistofverblijftijd van 5 minuten, een vloeistofhoogte van 80 % en een lengte/diameter verhouding van 4. Met deze gegevens kunnen de dimensies van het vat bepaald worden.

V.2. DEHYDROGENERINGSPROCES.

V.2.1. Reactoren.

Doordat de teruggaande reactie erg endotherm is moet er veel warmte toegevoerd worden tijdens het verloop van de reactie. Er zijn nu weer de zelfde twee mogelijkheden als bij de hydrogenering. Hier wordt weer om de praktische haalbaarheid gekozen voor een cascade van adiabatische bedden net daartussen verwarmingselementen in de vorm van ovens gestookt met waterstof.

Om de verschillende reactoren door te optimaliseren en door te rekenen kunnen dezelfde soort programma's geschreven worden als voor de hydrogenering (zie hiervoor bijlages 1, 2 en 3).

Ook hier zijn naar schatting zes reactoren nodig om een conversie van 98 - 99 procent te halen.

V.2.2. Warmtewisselaars.

Het merendeel van de aanwezige warmtewisselaars zijn ovens waarin een klein deel van de geproduceerde waterstof wordt verbrand om de voeding en de stromen tussen de reactoren op te warmen.

De uitgaande stroom uit de laatste reaktor kan gebruikt worden om één van de ingaande stromen gedeeltelijk op te warmen.

De warmteoverdrachtscoëfficiënt in de ovens is laag (circa $200 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K})$) doordat de op te warmen stromen in de gasfase verkeren.

Verder is er nog een koeler nodig om de restwarmte te verwijderen van de eindstroom en hiermee meteen de toluen te condenseren. Hierbij wordt de eindstroom afgekoeld tot ongeveer 40°C .

V.2.3. Fasenscheidingen.

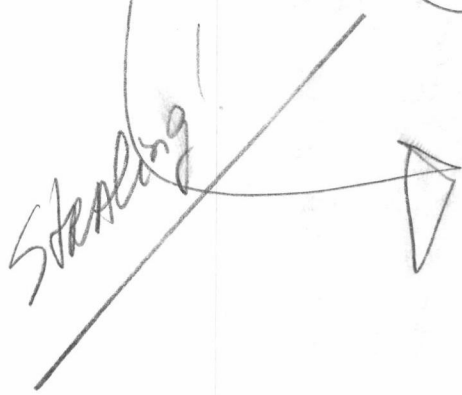
De enig aanwezige fasenscheider in het systeem is de condensor van de eindstroom, waar de toluen van de waterstof afge-scheiden wordt. Hier wordt eerst het grootste deel van de warmte verwijderd door uit te wisselen met de voeding. De rest wordt verwijderd met behulp van koelwater.

Een gedeelte van de waterstof wordt gerecycled om aan het begin van de eerste reaktor een vijfvoudige overmaat waterstof ten opzichte van MCH te hebben.

20 mda

$172 \text{ kcal}/\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C}$

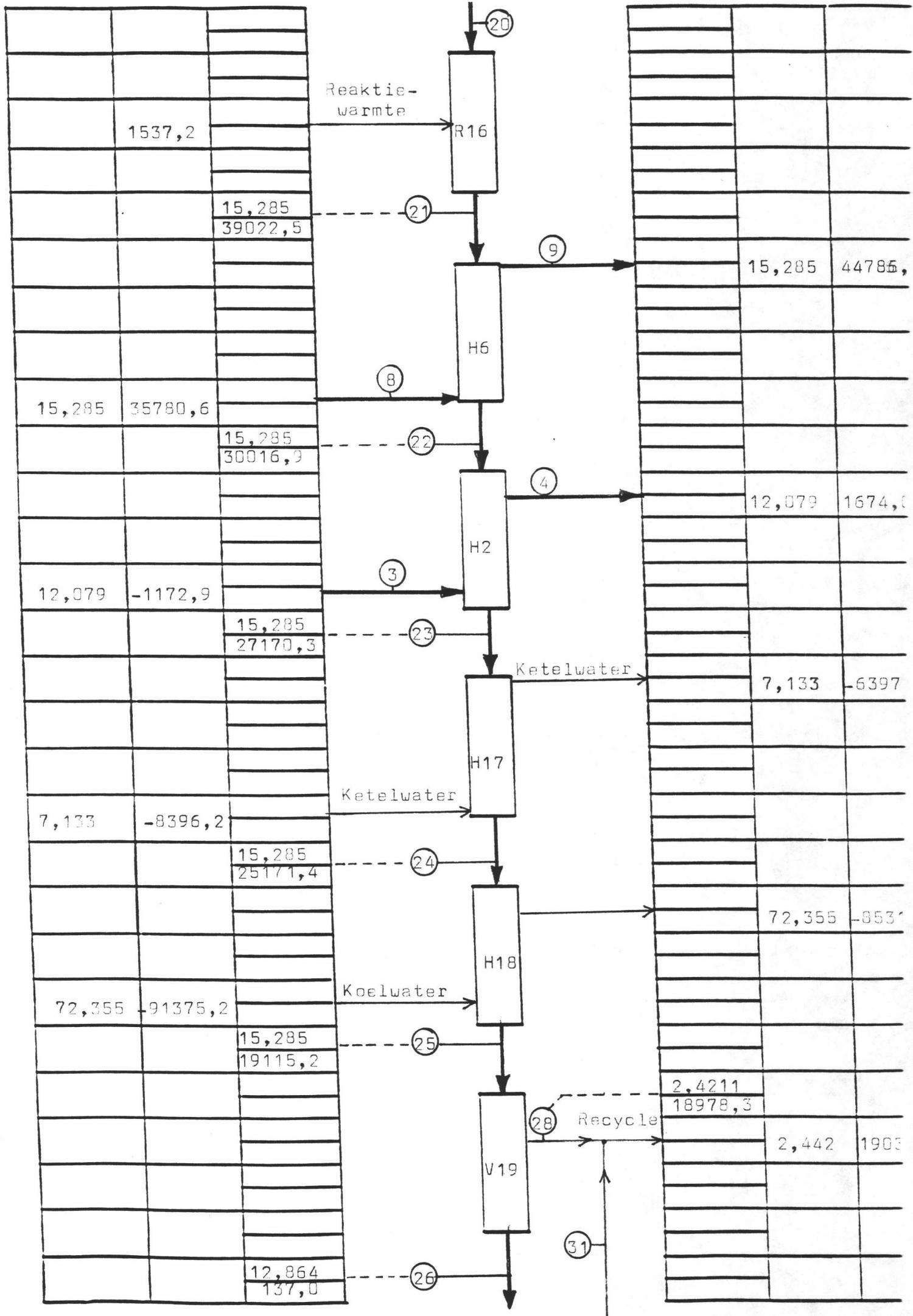
50% door straling
50% convection
heat duty
trans fer
Maximum 90-80%



$8000 \text{ BTU}/\text{hr} \cdot \text{ft}^2$
 $1 \text{ BTU}/\text{ft}^2 = 0.27 \text{ kcal}/\text{m}^2$
 $= 2.17 \text{ kcal}/\text{m}^2 \cdot \text{hr}$
 $20 \text{ kcal}/\text{m}^2 \cdot \text{hr}$

VI. MASSA- en WARMTEBALANSEN

Hieronder volgen de massa- en warmtebalansen in het totaal in blokschema en de opbouw uit componenten in aparte stroom/componenten-staten.



Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	1		2	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	11.817			
MCH	0.262			
Waterstof			0.765	
TOTAAL:	12.079	-1216.8	0.765	7218.1

Apparaat-stroom →	3		4	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	11.817		11.817	
MCH	0.262		0.262	
Waterstof				
TOTAAL:	12.079	-1172.9	12.079	1674.0

Apparaat-stroom →	5		6	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	11.817		11.817	
MCH	0.262		0.262	
Waterstof				
TOTAAL:	12.079	7467.0	12.079	8714.3

M in kg/s

Q in kW

Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	7		8	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen			11.822	
MCH			0.767	
Waterstof	0.765		2.697	
TOTAAL:	0.765	8029.1	15.285	35780.6

Apparaat-stroom →	9		10	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	11.822		8.574	
MCH	0.767		4.227	
Waterstof	2.697		2.483	
TOTAAL:	15.285	44786.1	15.285	50089.2

Apparaat-stroom →	11		12	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	8.574		8.574	
MCH	4.227		4.227	
Waterstof	2.483		2.483	
TOTAAL:	15.285	48841.9	15.285	44110.6

M in kg/s

Q in kW

Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	13		14	
↓ Componenten	M	Q	M	Q
Tolueen	6.287		6.287	
MCH	6.664		6.664	
Waterstof	2.333		2.333	
TOTAAL:	15.285	47844.7	15.285	42051.7

Apparaat-stroom →	15		16	
↓ Componenten	M	Q	M	Q
Tolueen	4.211		4.211	
MCH	8.876		8.876	
Waterstof	2.197		2.197	
TOTAAL:	15.285	45441.9	15.285	41093.9

Apparaat-stroom →	17		18	
↓ Componenten	M	Q	M	Q
Tolueen	2.545		2.545	
MCH	10.652		10.652	
Waterstof	2.088		2.088	
TOTAAL:	15.285	43815.3	15.285	39476.4

M in kg/s

Q in kW

Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	19		20	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	1.117		1.117	
MCH	12.174		12.174	
Waterstof	1.994		1.994	
TOTAAL:	15.285	41808.1	15.285	37485.3

Apparaat-stroom →	21		22	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.175		0.175	
MCH	13.177		13.177	
Waterstof	1.932		1.932	
TOTAAL:	15.285	39022.5	15.285	30016.9

Apparaat-stroom →	23		24	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.175		0.175	
MCH	13.177		13.177	
Waterstof	1.932		1.932	
TOTAAL:	15.285	27170.3	15.285	25171.4

M in kg/s
Q in kW

Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	25		26	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.175		0.171	
MCH	13.177		12.690	
Waterstof	1.932		0.003	
TOTAAL:	15.285	19115.2	12.864	137.0

Apparaat-stroom →	27		28	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.171		0.005	
MCH	12.672		0.487	
Waterstof	0.0001		1.929	
TOTAAL:	12.843	101.8	2.421	18978.3

Apparaat-stroom →	29		30	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.005		0.0002	
MCH	0.487		0.017	
Waterstof	1.929		0.003	
TOTAAL:	2.421	18978.3	0.021	35.2

M in kg/s
Q in kW

Stroom/componenten-staat

Apparaat-stroom →	31		32	
	M	Q	M	Q
↓ Componenten				
Tolueen	0.0002		0.005	
MCH	0.017		0.505	
Waterstof	0.003		1.932	
TOTAAL:	0.021	58.9	2.442	19037.1

M in kg/s

Q in kW

VII. OVERZICHT SPECIFIKATIE APPARATUUR

Hieronder volgen de verschillende specificatiebladen voor warmtewisselaars, reaktoren, pompen en flashvaten.

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 2 Aantal : 1. serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Opwarmen toluenestroom
 en afkoelen eindstroom

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

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

Positie : horizontaal/~~vertikaal*~~

Kapaciteit : 2846,9 . . . kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : 336 . . . m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : 160 . . . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : 53,9 . . . °C
 Aantal passages pijpzijde : 1 . .
 Aantal passages mantelzijde : 1 . .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : 1 . .
 Gekorrigeerde LMTD : 53,9 . . . °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	tolueen . . .	organisch gas
Massastroom kg/s	12,079 . . .	15,285 . . .
Massastroom te verdampen /kondenseren* kg/s	2,844 . . .
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	1,853 . . .	3,745 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	360	317
Temperatuur IN °C	16	164
Temperatuur UIT °C	144	127
Druk bar	22	22
Materiaal

*Doorstrepen wat ni
 van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 3 . Aantal : .1. serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : ~~v~~erdampen toluervoeding

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

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

Positie : ~~horizontaal/vertikaal*~~

Kapaciteit : . . . 5793 . . . kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : . . . 259 . . . m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . . . 170 . . . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : . . . 131,5 . . . °C
 Aantal passages pijpzijde : . 1 . .
 Aantal passages mantelzijde : . 1 . .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : . 1 . .
 Gekorrigeerde LMTD : . . . 131,5 . . . °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	tolueen . .	organisch gas
Massastroom kg/s	. 12,079 . .	. 15,285 . .
Massastroom te verdampen/ kondenseren* kg/s	. 10,145
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	. 2,30 . .	. 4,34 . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. 360
Temperatuur IN °C	. 144 . .	. 382 . .
Temperatuur UIT °C	. 268 . .	. 295 . .
Druk bar	. 22 . .	. 22 . .
Materiaal

*Doorstrepen wat nie van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 4 .	Aantal : 1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie : Opwarmen tolu eenvoeding		
Type : Warmtewisselaar* Koeler Kondensor Verdamer		
Uitvoering : met vaste pijpplaten* floating head haarspeld dubbele pijp platenwarmtewisselaar		
Positie : horizontaal/vertikaal*		
Kapaciteit : . . . 1247 . . . kW (berekend)		
Warmtewisselend oppervlak : . . . 125 . . . m ² (berekend)		
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . . . 100 . . . W/m ² K (globaal)		
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : . . . 99,7 . . . °C		
Aantal passages pijpzijde : . 1 .		
Aantal passages mantelzijde : . 1 .		
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : . 1 .		
Gekorrigeerde LMTD : . . . 99,7 . . . °C		
BEDRIJFSKONDITIONES :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum toluen .	organisch gas
Massastroom kg/s	. 12,079 15,285 . . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* kg/s	. 1,93 - . . .
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	. 2,392 4,471 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. 360
Temperatuur IN °C	. 268 391 . . .
Temperatuur UIT °C	. 297 373 . . .
Druk bar	. 22 22 . . .
Materiaal

* Doorstrepen wat ni van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 6 . Aantal : 3. serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Voorverwarmen voeding eerste reaktor

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

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

Positie : horizontaal/~~vertikaal*~~

Kapaciteit : 3 X .3002 . kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : 3 X .891 . m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : 100 . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : 33,7 . °C
 Aantal passages pijpzijde : 4 .
 Aantal passages mantelzijde : 1 .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : 1 .
 Gekorrigeerde LMTD : 33,7 . °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	organisch gas	organisch gas
Massastroom kg/s	15,285 . . .	15,285 . . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* kg/s
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	3,924 . . .	4,035 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg
Temperatuur IN °C	314 . . .	132 . . .
Temperatuur UIT °C	164 . . .	278 . . .
Druk bar	22 . . .	22 . . .
Materiaal

*Doorstrepen wat ni van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 8 . Aantal : . 1. serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Verwijderen reaktiewarmte d.m.v.
 stoomgeneratie

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

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

Positie : ~~horizontaal/vertikaal*~~

Kapaciteit : . 4731 kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : . 177 m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . 172 . . . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : . 155 °C
 Aantal passages pijpzijde : . 1 .
 Aantal passages mantelzijde : . 1 .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75). : . 1 .
 Gekorrigeerde LMTD. : . 155 °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	water/stoom	organisch gas
Massastroom kg/s	. 1,9023 15,285 . . .
Massastroom te verdampen/ kondenseren* kg/s	. 1,9023
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg·°C	. 4,20/2,27 4,355 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. 2258
Temperatuur IN °C	. 107 373 . . .
Temperatuur UIT °C	. 252 302 . . .
Druk bar	. 12 22 . . .
Materiaal

*Doorstrepen wat ni
 van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 1.1 . Aantal : . 1 serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Verwijderen reaktiewarmte d.m.v. stoomgeneratie

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

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

Positie : ~~horizontaal/vertikaal*~~

Kapaciteit : . 4348 kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : . 166 m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . 170 . . . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : . 152 °C
 Aantal passages pijpzijde : . 1 .
 Aantal passages mantelzijde : . 1 .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : . 1 .
 Gekorrigeerde LMTD. : . 152 °C

BEDRIJFSKONDITIONS :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	water/stoom	organisch gas
Massastroom kg/s	. 1,748 15,285 . . .
Massastroom te verdampen/ kondenseren* kg/s	. 1,748
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg·°C	. 4,20/2,27 4,311 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. 2258
Temperatuur IN °C	. 107 368 . . .
Temperatuur UIT °C	. 252 302 . . .
Druk bar	. 12 22 . . .
Materiaal

*Doorstrepen wat nie van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 13.	Aantal : .1. serie/parallel*	
ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :		
Functie	: Verwijderen reaktiewarmte d.m.v. stoomgeneratie	
Type	: Warmtewisselaar* Koeler Kondensor Verdamper	
Uitvoering	: met vaste pijpplaten* floating head haarspeld dubbele pijp platenwarmtewisselaar	
Positie	: horizontaal /vertikaal*	
Kapaciteit	: . . . 4339 . . . kW (berekend)	
Warmtewisselend oppervlak	: . . . 174 . . . m ² (berekend)	
Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt	: . . . 170 . . . W/m ² K (globaal)	
Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD)	: . . . 145 . . . °C	
Aantal passages pijpzijde	: .1. .	
Aantal passages mantelzijde	: .1. .	
Korrektiefactor LMTD (min. 0,75).	: .1. .	
Gekorrigeerde LMTD.	: . . . 145 . . . °C	
BEDRIJFSKONDITIONES :		
	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	water/stoom	organisch gas
Massastroom kg/s	. 1,744 15,285 . . .
Massastroom te verdampen/kondenseren* kg/s	. 1,744
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg·°C	. 4,20/2,27 4,275 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. 2258
Temperatuur IN °C	. 107 362 . . .
Temperatuur UIT °C	. 252 295 . . .
Druk bar	. 12 22 . . .
Materiaal

*Doorstrepen wat ni van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 15. Aantal : .1. serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Verwijderen reaktiewarmte d.m.v.
 stoomgeneratie

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

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

Positie : ~~horizontaal/vertikaal*~~

Kapaciteit : . . . 4323 . . . kW (berekend)
 Warmtewisselend oppervlak : . . . 194 . . . m² (berekend)
 Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . . . 170 . . . W/m²K (globaal)
 Logaritmisch temperatuurverschil (LMTD) : . . . 129 . . . °C
 Aantal passages pijpzijde : .1. .
 Aantal passages mantelzijde : .1. .
 Korrektiefactor LMTD (min. 0,75) : .1. .
 Gekorrigeerde LMTD : . . . 129 . . . °C

BEDRIJFSKONDITIONS :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	water/stoom.	organisch. gas
Massastroom kg/s	. 1,738 15,285 . . .
Massastroom te verdampen/ kondenseren* kg/s	. 1,738
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	. 4,20/2,27 4,210 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg	. . 2258
Temperatuur IN °C	. . 107 346 . . .
Temperatuur UIT °C	. . 252 279 . . .
Druk bar	. . . 12 22 . . .
Materiaal

* Doorstrepen wat niet van toepassing is

WARMTEWISSELAARSPECIFIKATIEBLAD

Apparaatnummer : H. 17 . Aantal : 1 . serie/parallel*

ALGEMENE EIGENSCHAPPEN :

Functie : Afkoelen eindstroom door
 ketelwater voor te verwarmen

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

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

Positie : 'horizontaal/vertikaal*'

Kapaciteit : . . . 2000 . . . kW (berekend)

Warmtewisselend oppervlak : . . . 292 . . . m²(berekend)

Overallwarmteoverdrachtscoëfficiënt : . . . 170 . . . W/m²K(globaal)

Logaritmisches temperatuurverschil (LMTD) : . . . 40 . . . °C

Aantal passages pijpzijde : . 1 .

Aantal passages mantelzijde : . 1 .

Korrektiefactor LMTD (min. 0,75). : . 1 .

Gekorrijeerde LMTD. : . . . 40 . . . °C

BEDRIJFSKONDITIONES :

	Mantelzijde	Pijpzijde
Soort fluidum	ketelwater . .	organisch gas
Massastroom kg/s	. 7,133 15,285 . .
Massastroom te verdampen /kondenseren* kg/s	. . . - 3,765 . .
Gemiddelde soortelijke warmte kJ/kg °C	. 4,202 3,62 . . .
Verdampingswarmte kJ/kg 317 . . .
Temperatuur IN °C	. 40 127 . . .
Temperatuur UIT °C	. 107 112 . . .
Druk bar	. 12 22 . . .
Materiaal

*Doorstrepen wat nie van toepassing is

Apparatenlijst voor warmtewisselaars, fornuizen

Apparaat No:	H18:				
Benaming, type	koeler				
Medium pijpen-/ mantelzijde	koelwater organisch gas				
Capaciteit, uitgewisselde warmte in kW.	6056				
Warmtewisselend oppevl. in m ²	282				
Aantal ^{serie/} paralel	1				
Abs. of eff.* druk in bar pijpen- / mantelzijde					
temp. in / uit in °C <u>pijpszijde</u> mantelzijde	20/40 112/40				
Speciaal te ge- bruiken mat.					

* aangeven wat bedoeld wordt

Apparatenlijst voor pompen, blowers, kompressoren

Apparaat No:	P1	C5	C22		
Benaming, type	pomp tolueen- voeding	compressor waterstof voeding	compressor recycle uit V21		
te verpompen medium	tolueen	waterstof	waterstof		
Capaciteit in t/d of kg/s*	kg/s 12,08	kg/s 0,765	kg/s 0,021		
Dichtheid in kg/m ³	869,2	1,00/1,45	0,48/5,38		
Zuig-/persdruk in bar(abs.of eff. *)	Pa 1/22	Pa 12/22	Pa 1/22		
temp. in °C in / uit	15/16	15/90	38/335		
Vermogen in kW theor./ prakt.	33/44	608/811	18/24		
Speciaal te ge- bruiken mat.					
aantal serie/parallel	1	1	1		

* aangeven wat bedoeld wordt

Apparatenlijst voor reactoren, kolommen, vaten

Apparaat No:	R7	R9	R10	R12	R14
Benaming, type	adiabatisch gepakt bed	adiabatisch gepakt bed	adiabatisch gepakt bed	adiabatisch gepakt bed	adiabatisch gepakt bed
Abs. of eff.* druk in bar	Pa 22	Pa 22	Pa 22	Pa 22	Pa 22
temp. in °C	278-392	302-382	295-368	303-362	295-347
Inhoud in m ³ Diam. in m l of h in m	3 0,98 4	2 0,92 3	2 0,92 3	2 0,92 3	2 0,92 3
Vulling:* schotels-aant. vaste pakking katalysator- type - , - vorm	nikkel op aerogel	nikkel op aerogel	nikkel op aerogel	nikkel op aerogel	nikkel op aerogel
Speciaal te ge- bruiken mat.					
aantal serie/parallel	1	1	1	1	1

H_2 34000 kcal/kg
 25000 kcal/s
 100.000 kg/s
 100 m²

$\frac{1}{2} m H_2$ 0,765 kg/s H_2
 toluen 17 kg/s

* aangeven wat bedoeld wordt

$13\frac{1}{2} l/s$
 $\times 3.6 = 50 m^3/h$
 $12\frac{1}{2} m^3$ reactor
 $LHSV = \frac{50}{12\frac{1}{2}} = 4$

VIII. ECONOMISCHE BESCHOUWINGEN

Bij deze beschouwingen is gebruik gemaakt van *A.G. Montfoort [17]*. Voor de totale operationele kosten, exclusief rente en afschrijvingen wordt gewerkt met het model:

$$\text{Totale kosten} = T_k = 1.13 \cdot K_p + 2.6 \cdot L + 0.13 \cdot I \quad (14)$$

met: K_p = produktiekosten
 L = loonkosten
 I = investeringskosten

De constanten zijn afkomstig van het 'beste model' uit *A.G. Montfoort [17]*.

VIII.1. PRODUKTIE AFHANKELIJKE KOSTEN

De produktie afhankelijke kosten worden bepaald door de kosten van reaktanten, hulpstoffen en utilities per jaar. De eenheidsprijzen van de grondstoffen en utilities zijn verkregen uit *A.G. Montfoort, e.a. [18]*. De resultaten zijn opgesomd in tabel 2.

Tabel 2: Kosten reaktanten, hulpstoffen en utilities.

Stof	Eenheidsprijs	Verbruik/jaar	Kosten/jaar
Waterstof	1800 f/ton	22.03 kton	39.65 Mf
Tolueen	374 f/ton	335.40 kton	125.44 Mf
Elektriciteit	0.1 f/kWh	$7.03 \cdot 10^6$ kWh	0.703 Mf
Koelwater	0.05 f/ton	2076.34 kton	0.104 Mf

De opbrengsten van het proces zijn vermeld in onderstaande tabel 3.

Tabel 3: Opbrengsten van de produkten.

Stof	Eenheidsprijs	Produktie/ jaar	Opbrengst/ jaar
MCH	450 f/ton	357.93 kton	161.07 Mf
Energie	0.1 f/kWh	$3.30 \cdot 10^7$ kWh	3.30 Mf

waar vandaan?

et stoom?

Tolueen 335000 ton/jaar
 $\div 8000$ 42 ton/uur
 $\div 3600$ 12 kg/s

oke!

VIII.2. LOONAFHANKELIJKE KOSTEN

De loonkosten zijn bepaald met de Wesselrelatie:

$$\frac{\text{manuren}}{\text{ton product}} = \frac{1.7 * N}{(\text{capaciteit/dag})^{0.76}} \quad (15)$$

Hierin is N het aantal secties. Uit de Wesselrelatie kan de volgende formule voor de totale loonsom afgeleid worden:

$$L = 32 * N * C^{0.24} \quad (16)$$

met: L = totale loonsom [kf]
 N = aantal stappen
 C = capaciteit [kton/yr]

In dit proces is het aantal secties ongeveer 9. Met een capaciteit van 370 kton/yr, bedraagt de totale loonsom f 1.2*10⁶ per jaar.

↓ 324 stappen
↓ te veel

VIII.3. INVESTERINGSKOSTEN

Voor de berekening van de investeringskosten zijn een groot aantal methoden voor handen. Er zijn er twee uitgewerkt, met als eerste de stap-methode van Zevnik-Buchanan.

Hier wordt als eerste een complexity-factor uitgerekend (C_f) waarin rekening wordt gehouden met maximale temperatuur en druk en de gebruikte materialen.

In dit geval:

$$\begin{aligned} F_t &= 0.0675 \\ F_p &= 0.13 \\ F_m &= 0.2 \\ C_f &= 2 * 10^{(F_t + F_p + F_m)} = 4.99 \end{aligned}$$

156.000.000
370.000
500 gld/tacon

Met 9 stappen en een C.E.-Plant Cost Index van 356 (uit 1989) wordt de totale investering 5.55*10⁷ \$ = 1*10⁸ f.

Deze waarde is de investering in de proceseenheden. Dit is voor de 'gemiddelde Nederlandse chemische fabriek' ongeveer 64% van de totale investering. De rest is voor hulpapparatuur, niet-tastbare zaken (zoals licenties, knowhow, start-up kosten, enz.) en werkkapitaal, voorraden, cash en terreinen.

De totale investering bedraagt dus 1.56*10⁸ f.

Als tweede methode werd de stap-methode van Wilson gebruikt. In dit geval geldt voor dit geval:

AUC	= 1.2*10 ⁵	Average Unit Cost [£]
Fp	= 1.1	Correctiefactor voor druk
Ft	= 1.14	Correctiefactor voor temperatuur
Fm	= 1.5	Correctiefactor voor materialen
f	= 1.8	Investeringsfactor (Lang-factor)

De investering wordt hiermee (21 apparaten (exclusief pompen en inclusief stoomturbine)): $8.5 \cdot 10^6 \text{ £} = 7.4 \cdot 10^7 \text{ f}$.

Gecorrigeerd voor utilities e.d. wordt de totale investering $1.16 \cdot 10^8 \text{ f}$.

De methode volgens Wilson zit waarschijnlijk dichterbij de realiteit aangezien het bij methode volgens Zevnik-Buchanan het moeilijk is het juiste aantal functionele eenheden te bepalen.

VIII.4. TOTALE KOSTEN

De totale jaarlijkse kosten kunnen nu worden bepaald met formule 14 :

$$T_k = 1.13 \cdot 165.9 + 2.6 \cdot 1.2 + 0.13 \cdot 116 = 207.1 \text{ Mf/jaar}$$

VIII.4.1. Rente

Doordat bij de bouw van een fabriek geld wordt vastgelegd in goederen en apparaten wordt er rente gederft. De rente wordt berekend over het working capital en de helft van het fixed capital. Het working capital is ongeveer 6% van de totale investeringen. Het fixed capital is 80% van de totale investeringen.

De rente (met een rentepercentage van 10%) bedraagt 5.3 Mf per jaar.

VIII.4.2. Afschrijving

Het fixed capital gedeelte van de investeringen wordt afgeschreven naar een eindwaarde van nul in tien jaar via de 'sum of digits' methode.

De jaarlijkse afschrijving via de 'sum of digits' methode staat vermeld in tabel 4.

Tabel 4: Jaarlijkse afschrijving via 'sum of digits' methode. Totaal bedrag = 92.8 Mf.

jaar	afschrijving	jaar	afschrijving
1	16.9 Mf	6	8.4 Mf
2	15.2 Mf	7	6.7 Mf
3	13.5 Mf	8	5.1 Mf
4	11.8 Mf	9	3.4 Mf
5	10.1 Mf	10	1.7 Mf

VIII.5. ECONOMISCHE CRITERIA

Tot slot wordt met de berekende gegevens een aantal grootheden bepaald om de rentabiliteit van het proces bekijken.

VIII.5.1. Pay out time (POT)

De POT is gedefinieerd als het fixed capital gedeeld door het exploitatie-overschot (E_o). Het exploitatie-overschot is het verschil tussen de verkoopopbrengst en de produktiekosten. Belasting, afschrijving en rente worden hierin niet meegenomen en de POT is daarom een indicatie van het risico op het kapitaal.

In dit geval draait de fabriek echter verlies (er is een negatief exploitatie-overschot van 1.5 Mf/jaar), waardoor geen POT berekend kan worden. Het exploitatie-overschot is gebaseerd op de opbrengst van methylcyclohexaan als eindprodukt. Methylcyclohexaan is echter een opslagmedium voor waterstof en kan dus niet gezien worden als eindprodukt. De kosten kunnen echter vergeleken beter worden met andere vormen van waterstof-opslag (zie hoofdstuk XI.5.3.).

VIII.5.2. Return on interest (ROI)

De ROI wordt berekend door de jaarlijkse netto-winst te delen door de totale investeringen. Ook dit is hier niet van toepassing, aangezien er geen winst wordt gemaakt.

VIII.5.3. Vergelijk met andere opslagmogelijkheden

Om de kosten per opgeslagen hoeveelheid energie te vergelijken met andere opslagmogelijkheden is gebruik gemaakt van een uitdrukking voor de opslagkosten per eenheid van geleverde energie (\$/kWh) volgens C. Carpetis [19]:

$$C_u = \frac{1}{H_u} \left[\alpha \left(\frac{C_c}{A_c P} + \left(\frac{C_{sMCH}}{d_{MCH}} + \frac{C_{sT}}{d_T} \right) \cdot \frac{R_c}{N_c} \right) + \frac{C_{th} E_{th} + C_e E_e}{P} \right] \quad (17)$$

met:

- H_u = Hydrogen lower heating value = 33.34 kWh/kg
- α = Fixed capital charge rate = 0.2
- A_c = Yearly utilization in charging phase [h/yr]
- C_c = Capital cost for power associated subsystem [\$]
- P = Power level determined by charging power [kg/h of H_2]
- C_{sMCH} = Specific MCH and tank cost [\$/m³]
- d_{MCH} = Hydrogen density in MCH [kg of H_2 /m³ of MCH]
- C_{sT} = Specific toluene and tank cost [\$/m³]
- d_T = Amount of H_2 stored related to storage volume of toluene [kg of H_2 /m³ of toluene]
- R_c = Storage capability factor.
- N_c = Number of charging procedures per year [1/yr]

C_{th}	= Specific cost of thermal energy [\$/kWh]
E_{th}	= Thermal energy input [kW]
C_e	= Specific cost of electric energy [\$/kWh]
E_e	= Electrical power input [kW]

R is de verhouding tussen maximale en gemiddelde opgeslagen hoeveelheid en is een maat voor de benodigde overmaat tankruimte. Voor wekelijkse opslag is R ongeveer 2 tot 4. Voor seizoen-opslag ongeveer 80.

Bij het vergelijken zullen de volgende modellen behandeld worden (overgenomen van G. Cacciola, e.a. [20], [21], gebaseerd op een capaciteit van 200 MW):

- Opslag onder lage druk (12 bar) (LP)
- Vloeibare waterstof opslag (LH)
- Opslag als metaalhydride (aan FeTi) (MH)
- Cryogene opslag aan adsorberend materiaal (CA)

De investeringen van de hydrogeneringsfabriek worden omgewerkt naar 200 MW, door het model volgens Wilson toe te passen op een twee keer zo grote productie. De investering wordt hiermee $118 \cdot 10^6$ f.

De investering benodigd voor de dehydrogeneringsfabriek wordt geschat met de volgende aannames (naar analogie met de hydrogeneringsfabriek):

De fabriek bestaat uit:

- 6 reactoren
- 6 verwarmers
- 1 flashvat
- 1 koeler
- 2 warmtewisselaars
- 2 compressoren (1 voor voeding, 1 voor reflux)

$$\begin{aligned} \text{Druk} = 5 \text{ bar} & \rightarrow F_p = 1 \\ \text{Temperatuur} = 470 \text{ }^\circ\text{C} & \rightarrow F_t = 1.14 \\ & F_m = 1.5 \end{aligned}$$

Hiermee kan de investering voor de dehydrogeneringsfabriek geschat worden op $90.1 \cdot 10^6$ f. De totale investeringen (C_c) worden hiermee $208.1 \text{ Mf} = 113.1 \text{ M\$}$. Om deze waarde te gebruiken bij het vergelijken moet deze omgerekend worden naar de situatie van 1977 (waarop de gegevens van G. Cacciola, e.a. [20], [21] gebaseerd zijn). Hierom wordt dit getal gedeeld door 1.75 (verkregen door zowel de 'M&S Installed Equipment Index' als de 'Chem. Eng. Plant Cost Index' van 1989 en 1977 op elkaar te delen). Hierdoor wordt de investering voor 1977 $64.6 \text{ M\$}$.

Er wordt aangenomen dat de totale dehydrogeneringswarmte moet worden opgebracht in de fabriek.

Het totale pompvermogen wordt geschat op 2760 kW.

Verdere gegevens zijn overgenomen uit G. Cacciola, e.a. [20], [21].

De hiermee verkregen vergelijking voor de opslagkosten van waterstof voor het systeem MCH/Tolueen luidt:

$$C_u = 70.4/A_c + 0.0641 \cdot R_c/N_c - 3.52 \cdot 10^{-5} \quad [$/kWh]$$

De door G. Cacciola, e.a. [20], [21] vermelde resultaten voor andere manieren van opslag luiden:

$$\begin{aligned} \text{LP:} \quad C_u &= 2.975/A_c + 2.564 \cdot R_c/N_c + 0.35 \cdot 10^{-3} \\ \text{LH:} \quad C_u &= 32.9 /A_c + 0.089 \cdot R_c/N_c + 10 \cdot 10^{-3} \\ \text{MH:} \quad C_u &= 4.01 /A_c + 2.77 \cdot R_c/N_c + 0.56 \cdot 10^{-3} \\ \text{CA:} \quad C_u &= 17.1 /A_c + 1.05 \cdot R_c/N_c + 3.25 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

Er worden nu drie verschillende opslagmogelijkheden grafisch uitgewerkt:

- Kortstondige opslag: $R_c=2$ $N_c=280$
- Wekelijkse opslag: $R_c=4$ $N_c=280$
- Seizoen-opslag: $R_c=80$ $N_c=200$

De grafieken zijn weergegeven in figuren 10, 11 en 12. Het is duidelijk dat de MCH/Tolueen methode gunstig is voor langdurige opslag. Dit komt door de relatief hoge begininvesteringen in de hydrogenerings- en dehydrogeneringsfabriek, die echter lonend worden door de goedkope langdurige opslag van MCH.

IX. SYMBOLENLIJST

Symbol	Eenheid	Omschrijving
A	kPa ³	Pre-exponentiële factor van K _{eq}
A _c	h/yr	Yearly utilization in charging phase
AUC	£	Average Unit Cost
C	kton/yr	Capaciteit
C _c	\$	Capital cost for power associated subsystem
C _e	\$/kWh	Specific cost of electric energy
C _f	-	Complexity-factor van Zevnik-Buchanan
C _{Pi}	J/mol.K	Warmtecapaciteit stof i
ΔC _p	J/mol.K	Verandering in warmtecapaciteit door reactie
C _{sMCH}	\$/m ³	Specific MCH and tank cost
C _{sT}	\$/m ³	Specific toluene and tank cost
C _{th}	\$/kWh	Specific cost of thermal energy
C _u	\$/kWh	Opslagkosten per eenheid opgeslagen energie
d _{MCH}	kg H ₂ /m ³ MCH	Hydrogen density in MCH
d _T	kg H ₂ /m ³ TOL	Amount of hydrogen stored related to storage volume of toluene
E _e	kW	Electrical power input
E _o	f	Exploitatie-overschot
E _{th}	kW	Thermal energy input
f	-	Investeringsfactor
F _m	-	Correctiefactor gebruikte materialen
F _p	-	Correctiefactor maximale druk
F _t	-	Correctiefactor maximale temperatuur
h	W/m ² .K	Warmteoverdrachtscoëfficiënt
ΔH _r	J/mol	Reactie-enthalpie
ΔH _r ^o	J/mol	Standaard reactie-enthalpie
H _u	kWh/kg	Hydrogen lower heating value
I	f	Investeringskosten
k	mol/g.s.kPa	Reaktiesnelheidsconstante
K _{eq}	kPa ³	Evenwichtsconstante
K _p	f	Productiekosten
K _t	kPa ⁻¹	Tolueen-absorptieconstante
L	kf	Loonkosten
M	kg/s	Massastroom
N	#	Aantal secties in fabriek
N _c	yr ⁻¹	Number of charging procedures per year
P	kg H ₂ /h	Power level determined by charging power

P_{HYD}	kPa	Partiaalspanning waterstof
P_{MCH}	kPa	Partiaalspanning methylcyclohexaan
P_{TOL}	kPa	Partiaalspanning toluen
P_{TOL}°	kPa	Dampspanning toluen ingaande stroom
P_{TOT}°	kPa	Totaaldruk ingaande stroom
Q	kW	Warmtestroom
r	mol/g.s	Reaktiesnelheid
r_{TOL}	mol/m ³ .s	Reaktiesnelheid toluen
R	J/mol.K	Universele gasconstante
R_c	-	Storage capability factor
T	K	Temperatuur
T_k	f	Totale kosten
T_o	K	Ingangstemperatuur
T_r	K	Referentie-temperatuur
U_v	m/s	Dampsnelheid
V	m ³	Reaktorvolume
X	-	Conversie

Griekse symbolen

α	-	Fixed Capital charge rate
ε	-	Fractie volumeverandering bij reactie
θ_i	-	Voedingsverhouding tussen stof i en stof waarop conversie gedefinieerd is
ϕ_{TOLo}	mol/s	Ingaande stroom toluen
ρ_l	kg/m ³	Dichtheid vloeistoffase
ρ_v	kg/m ³	Dichtheid gasfase

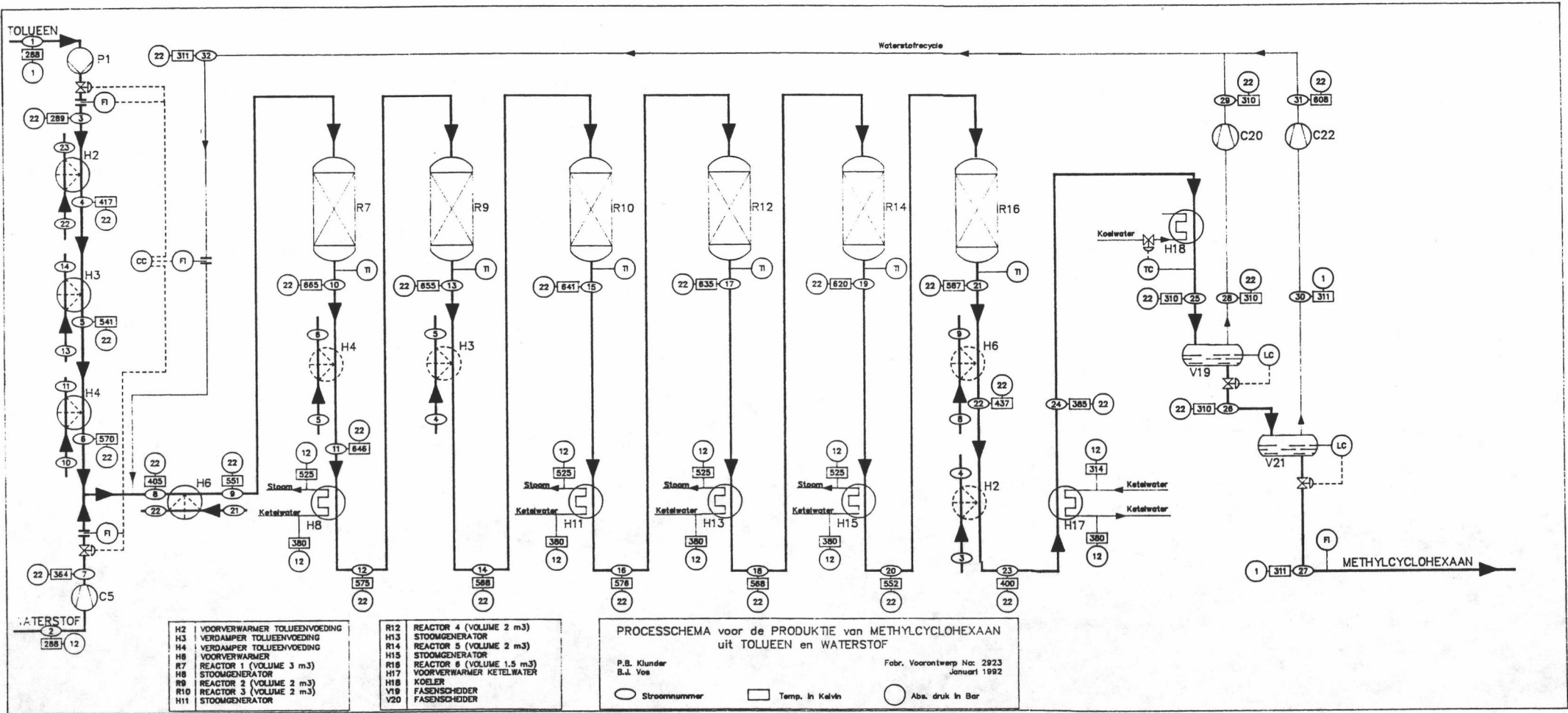
X. LITERATUURLIJST

- [1] A. Touzani; D. Klvana; G. Bélanger, *International Journal of Hydrogen Energy*, 9(11), p 929-936, 1984.
- [2] J. Gretz; J.P. Baselt; O. Ulmann; H. Wendt, *International Journal of Hydrogen Energy*, 15(6), p 419-424, 1990.
- [3] R.K. Sinnott; J.M. Coulson; J.F. Richardson, *Chemical Engineering Volume 6*, Pergamon Press, Oxford, 1991.
- [4] O. Sultan; M. Shaw, *TEC-75/003*, ERDA, Ann Arbor, 1975.
- [5] L.E. Faith; G.H. Ackerman; C.K. Heck; H.T. Henderson; A.W. Ritchie; L.B. Ryland, *Hydrocarbon Fuels for Advanced Systems*, AFAPL-TR-70-71, Part III, 1972.
- [6] J. Akyurtlu; E. Stewart, *Journal of Catalysis*, 51, p 101, 1978.
- [7] T.K. Rimensberger, *Kinetische Untersuchungen der Dehydrierung von Methylcyclohexan zu Toluol im Mikropulsreaktor, im kontinuierlichen Mikroreaktor und im Laborfestbettreaktor*, ETH Nr.8278, p 60-63, Zürich, 1987
- [8] L.M. Mamaladze; S.L. Kiperman, *Kinetics and Catalysis*, 16(2), p 1305-1312, 1975.
- [9] N. Ganesh Karanth; Ronald Hughes, *Journal of Applied Chemistry (and Biotechnology)*, 23, p 817-827, 1972.
- [10] D. Klvana; J. Chaouki; D. Kusohorsky; C. Chavarie, *Applied Catalysis*, 42, p 121-130, 1988.
- [11] J.H. Sinfelt; H. Hurwitz; R.A. Shulman, *Journal Physical Chemistry*, 64, p 1559-1562, 1960.
- [12] A. Touzani; D. Klvana; G. Bélanger, *Catalysis on the Energy Scene*, p 357-364, Elsevier Science Publishers B.V., Amsterdam, 1984.
- [13] K. Jothimurugesan; Subhash Bhatia; Rameshwar D. Srivastava, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 24, p 433-438, 1985.
- [14] R. Aris, *The Optimal Design of Chemical Reactors*, *Mathematics in Science and Engineering Vol.3*, p 105-110, Academic Press, New York, 1961.
- [15] RRGRAPH, version 5.05a, Reactor Research Foundation, Delft, 1991.
- [16] RKPAC, Reactor Research's Runge Kutta-PACKAGE version 5.01, Reactor Research Foundation, Delft, 1990.
- [17] A.G. Montfoort, *Dictaat 'De Chemische Fabriek'*, st 44, Deel II, TU Delft, Faculteit der Scheikundige Technologie en der Materiaalkunde, Delft, 1989.
- [18] A.G. Montfoort; F.A. Meijer; A. van den Ham, *Handleiding voor het maken van een Fabrieksvoorontwerp*, TU Delft, Faculteit der Scheikundige Technologie en der Materiaalkunde, Delft, December 1989.
- [19] C. Carpetis, *International Journal of Hydrogen Energy*, 5, p 423-437, 1980.
- [20] G. Cacciola; N. Giordano; G. Restuccia, *International Journal of Hydrogen Energy*, 9, p 411-419, 1984.
- [21] G. Cacciola; N. Giordano, *Hydrogen Energy Progress - IV*, Vol. 3, Proceedings of the 4th World Hydrogen Energy Conference, California, Pergamon Press, New York, 1982.
- [22] F.L. Evans, *Equipment Design Handbook*, 2 ed., Gulf P.C., Houston, 1980, 153 e.v.

BIJLAGEN

1. Processchema voor de produktie van Methylcyclohexaan uit Tolueen en Waterstof.
2. PASCAL-programma dat het verband tussen conversie en temperatuur in een abiabatisch bed berekent.
3. PASCAL-programma dat lijnen berekent met gelijke reaktiesnelheid.
4. PASCAL-programma voor doorrekening/optimalisatie van adiabatische bedden.
5. Voorbeeldberekening van een waterverdamer.
6. Voorbeeldberekening van een opwarmer/afkoeler.
7. Voorbeeldberekening van een koeler voor de verwijdering van de restwarmte.
8. Nomogram voor de berekening van flashvaten (*Evans [22]*).

Biilage 1: Processchema voor de produktie van
Methylcyclohexaan uit Tolueen en Waterstof.



Bijlage 2: PASCAL-programma dat het verband tussen conversie
en temperatuur in een adiabatisch bed berekent.

{Dit programma berekent de temperatuurstijging als gevolg van de}
{reactiewarmte in een adiabatisch katalysatorbed. }

{ \$N+ }

program WW;

Uses Crt;

const Ahyd= 27.143; {Cp constanten in J/(mol.K)}

Bhyd= 9.273E-3;

{waterstof}

Chyd= -1.380E-5;

Dhyd= 7.645E-9;

Atol=-24.355;

Btol= 5.124E-1;

{tolueen}

Ctol= -2.765E-4;

Dtol= 4.911E-8;

Amch=-61.919;

Bmch= 7.841E-1;

{methylcyclohexaan}

Cmch= -4.438E-4;

Dmch= 9.365E-8;

deltaHr298=-204765;

POmch= 0;

POTol= 2;

{partiaalspanningen voeding in bar}

POhyd=20;

Tmax=700;

{maximum temperatuur in Kelvin}

var X,

{conversie}

XO,

{conversie op t=0}

deltaX,

{stapgrootte conversie}

T,

{temperatuur}

TO,

{temperatuur op t=0}

molen,

{aantal molen relatief t.o.v. voeding}

afkoel,

{warmte-inhoud mengsel t.o.v. 298 K}

reactie,

{voor delta reactie }

toheat,

{reactiewarmte 298 K}

Probheat,

{warmte-inhoud mengsel t.o.v. 298 K}

a,

{na delta reactie }

b,

{warmte-inhoud mengsel t.o.v. 298 K}

c:real;

{op geschatte temperatuur na delta }

i:integer;

{reactie}

RIJ:array[1..100] of real;

{fractie methylcyclohexaan}

Z:char;

{fractie tolueen}

{fractie waterstof}

{teller}

{array t.b.v. berekende waarden}

```
Procedure Fractie(Conv:real;var alfa:real;var beta:real;var gamma:real;
                 var molstr:real);
```

```
{Deze procedure rekent m.b.v. de conversie en de partiaalspanningen op}
{t=0 de fracties uit van tol, mch en hyd. }
```

```
var Ptot,Pmch,Ptol,Phyd,
    E,
    P0tot:real;
```

```
begin
```

```
P0tot:=P0tol+P0mch+P0hyd;
E:=-3*P0tol/P0tot;
Pmch:=(P0mch+Conv*P0tol)/(E*Conv+1);
Ptol:=P0tol*(1-Conv)/(E*Conv+1);
Phyd:=(P0hyd-3*Conv*P0tol)/(E*Conv+1);
Ptot:=Pmch+Ptol+Phyd;
```

```
alfa:=Pmch/Ptot;
beta:=Ptol/Ptot;
gamma:=Phyd/Ptot;
```

```
molstr:=(1+P0mch/P0tol)*(1+P0hyd/(P0tol+P0mch))-3*Conv;
```

```
end;
```

```
Procedure Heat(var Q:real;Tb,Te,alfa,beta,gamma:real);
```

```
{Deze procedure berekent de warmte-inhoud van het mengsel t.o.v. een }
{bepaalde temperatuur. }
```

```
var A,B,C,D:real;
```

```
begin
```

```
A:=alfa*Amch+beta*Atol+gamma*Ahyd;
B:=alfa*Bmch+beta*Btol+gamma*Bhyd;
C:=alfa*Cmch+beta*Ctol+gamma*Chyd;
D:=alfa*Dmch+beta*Dtol+gamma*Dhyd;
```

```
Q:=(A*Te+(B*sqr(Te))/2+(C*sqr(Te)*Te)/3+(D*sqr(Te*Te))/4)-
    (A*Tb+(B*sqr(Tb))/2+(C*sqr(Tb)*Tb)/3+(D*sqr(Tb*Tb))/4);
```

```
end;
```

```
{---Hoofdprogramma---}
```

```
begin
  ClrScr;                                {scherm schoonmaken}
  T0:=550;                                {start temperatuur t=0}
  X0:=P0mch/(P0mch+P0tol);                {berekening conversie op t=0 uit }
                                          {partiaalspanningen           }
  deltaX:=(1-X0)/100;                     { 100 reactie stappen}
  T:=T0;
  write('Busy, Please Wait !');
  for i:=1 to 100 do
    begin
      if T<Tmax then                       {Als T hoger dan Tmax -> stoppen }
        begin
          X:=X0+(i-1)*deltaX;
          Fractie(X,a,b,c,molen);
          Heat(Afkoel,T,298,a,b,c);
          afkoel:=afkoel*molen ;
          reactie:=deltaX*deltaHr298;
          Fractie(X+deltaX,a,b,c,molen);
          TotHeat:=abs((reactie+afkoel)/molen );
          repeat                            {Berekening T na delta-reactie }
            begin
              Heat(Probheat,298,T,a,b,c);
              if Probheat>TotHeat then T:=T+(Probheat-Totheat)/200
              else
                T:=T+(Totheat-Probheat)/200;
            end;
          until abs(Probheat-Totheat)<0.01;
                                          {Nauwkeurigheid 1/100}
          RIJ[i]:=T;
        end
      else
        RIJ[i]:=0;
      end;
    end;
  clrscr;
  writeln('Temperatuur <----> Conversie');
  writeln(T0,' ',X0);
  for i:=1 to 100 do
    if RIJ[i]<>0 then
      begin
        writeln(RIJ[i],' ',X0+(i)*deltaX);
        if (((i/20)-(i div 20))=0) then
          begin
            Z:=readkey;
            clrscr;
            writeln('Temperatuur <----> Conversie');
          end;
        end;
      end;
    Z:=readkey;
  end.
end.
```

Bijlage 3: PASCAL-programma dat lijnen berekent met gelijke
reaktiesnelheid.

{N+}

PROGRAM isoreactionratecurvedata;

USES Crt;

CONST P0mch=0; {ingangsdruk MCH [kPa]}
P0tol=200; { " TOL }
P0hyd=2000; { " HYD }

VAR Tit {temperatuur}
:ARRAY [1..100,1..3] OF REAL;
x, {conversie}
P0tot, {totaaldruk [kPa]}
E, {relatieve volumeverandering}
rate, {reaktiesnelheid}
Pmch, {partiaaldruk MCH [kPa]}
Ptol, { " TOL }
Phyd, { " HYD }
verschil, {fout in temperatuur}
Tstart :REAL; {beginschatting temperatuur}
i,j :INTEGER;
filenaam :STRING;
uitvoer :TEXT;

{<<< begin procedures >>>}

PROCEDURE ITERATIE (Tbegin,p_x:real;var T:real);

VAR res, {fout in T}
r, {reaktiesnelheid}
Keq :real; {evenwichtsconstante}
teller :integer;

BEGIN

teller:=1;
Pmch:=(P0mch+p_x*P0tol)/(E*p_x+1);
Ptol:=P0tol*(1-p_x)/(E*p_x+1);
Phyd:=(P0hyd-3*p_x*P0tol)/(E*p_x+1);
T:=Tbegin;
REPEAT
BEGIN
Keq:=1.1231E27*exp(-26022/T);
r :=P0tot/P0tol*82.152*exp(-5622/T)*
(1-Keq*Pmch/Ptol/(Phyd*Phyd*Phyd));
res:=rate-r;
IF j=1 THEN T:=T+res/(rate);
IF j=2 THEN T:=T-res/(rate);
teller:=teller+1;
IF teller>5000 THEN writeln(r);
END;
UNTIL (abs(res)) < (rate/10000);
WRITELN ('T',j:1, ' = ',T:4:2, ' Iteraties = ',teller:5);

END;

{<<< einde procedure iteratie >>>}
{<<< begin hoofdprogramma >>>}

```

BEGIN
  ClrScr;
  Tstart:=600;           {beginschatting temperatuur}
  WRITE ('Rate [mol/(g.min)] = ');
  READLN (rate);        {te gebruiken reaktiesnelheid}
  WRITELN;
  POtot:=POMch+POtol+POhyd;
  E      :=-3*POtol/POtot;
  x      :=0.1;
  i      :=1;

  REPEAT
    BEGIN
      WRITELN ('Punt ',i:2,' Conversie = ',x:5:3);
      j:=1;
      ITERATIE (Tstart,x,Tit[i,j]);
      j:=2;
      ITERATIE (Tstart,x,Tit[i,j]);
      verschil:=Tit[i,2]-Tit[i,1];
      Tstart  :=Tit[i,1]+0.3*verschil;
      WRITELN;
      Tit[i,3]:=x;
      IF verschil > 25 THEN x:=x+0.05
      ELSE x:=x+(verschil/(300*i));
      i:=i+1
    END;
  UNTIL (verschil<1);

  {<<< uitvoerfile >>>}

  WRITE ('Geef naam uitvoerfile (compleet pad): ');
  READLN (filenaam);
  ASSIGN (uitvoer,filenaam);
  REWRITE (uitvoer);
  WRITELN (uitvoer,'Rate = ',rate);
  FOR j:=1 TO (i-1) DO
    BEGIN
      WRITELN(uitvoer,Tit[j,1],', ',Tit[j,3]);
      WRITELN(uitvoer,Tit[j,2],', ',Tit[j,3]);
    END;
  CLOSE (uitvoer);
END.

{<<< einde hoofdprogramma >>>}

```

Biilage 4: PASCAL-programma voor doorrekening/optimalisatie
van adiabatiscbe bedden.

{ \$N+ }

```
program GRKUSER (input, output);
```

```
uses RKMATH, GRKMATH, CRT;
```

```
const
```

```
  Eq      = 1;           {aantal differentiaalvergl.}
  AbsErr  = 1e-8;       {absolute fout}
  RelErr  = 1e-3;       {relatieve fout}
  Spc     = ' ';
```

```
type
```

```
  EqVect = array [1..Eq] of RKFloat;
```

```
var
```

```
  VolumeStart, VolumeEnd   : RKFloat;
  VolumeFinal, VolumeDelta : RKFloat;
  XStart, XEnd              : EqVect;
  ErrXAbs, ErrXRel         : EqVect;
  ReacConv                  : GRKProblem;
  AA, BB                    : RKFloat;   {coefficienten van lijnen }
                                   {van T als functie van X  }
  Xold                      : RKFloat;
  Tb                        : RKFloat;   {begintemperatuur}
  deltaTb                   : RKFloat;   {stap in Tb (voor optimalisatie}
  Deel                      : RKFloat;   {aantal gegeven punten}
  FAO                       : RKFloat;   {voeding TOL [mol/s]}
```

```
{<<< begin procedures >>>}
```

```
{ $F+ }
```

```
procedure ReacConvEqs (var Depend, Deriv);
```

```
{ $F- }
```

```
var
```

```
  X      : EqVect absolute Depend;
  dXdV   : EqVect absolute Deriv;
```

```
begin
```

```
  dXdV[1] := 2200/200*13692/FAO*exp(-5622/(BB+AA*X[1]))*
    (1-1.1231E27*exp(-26022/(BB+AA*X[1]))*(X[1]*200)/200/
    (1-X[1])/(exp(3*ln((2000-3*X[1]*200)/(-3*200/2200*X[1]+1)))));
```

```
end;
```

```
Procedure Cplijn (Tb,X:RKFloat; var A,B:RKFloat);
```

```
  Function CpB (j:RKFloat):RKFloat;   {coefficienten kiezen}
  begin
    CpB:=646.20-23.381*j;
  end;
```



```

Function CpA (j:RKFloat):RKFloat;           {coefficienten kiezen}
begin
  If j<6 then
    CpA:=425.93+2.78 *j
  else
    begin
      If j>17 then
        CpA:=381.47+3.9593*j
      else
        CpA:=438.95+0.61724*j;
    end;
  end;

var i,
    Ts:RKFloat;

begin
  i:=12;                                     {eerste schatting}
  While (abs(Tb-Ts)>0.01) do
  begin
    Ts:=CpA(i)*X+CpB(i);
    i:=i+10*(Ts-Tb)/Tb;
  end;
  A:=CpA(i);
  B:=CpB(i);
end;

{<<< eind procedures en begin hoofdprogramma >>>}

var
  FileName : string;
  OutFile  : text;
  Ready1,
  Ready2   : boolean;
  Eqi,i    : integer;
  Choise   : char;                           {keuze tussen gewoon door- }
                                              {rekenen of optimaliseren  }

begin
  Writeln;
  Write('Optimalisatie of doorrekenen ? (o/d) : ');
  Readln(Choise);
  if Choise = 'o' then
    begin
      Ready2 := false;
      Deel   := 1;
    end
  else
    begin
      Ready2 := true;           {alles wordt 1 keer doorlopen}
      Deel   := 10;           {en tien punten gegenereerd}
    end;
  Writeln;
  Write('Start Temperatuur (of schatting): '); Readln(Tb);
  Write('Doorzet Tolueen [mol/s]           : '); Readln(FA0);
  Write('Begin Conversie                   : '); Readln(Xstart[1]);
  Write('Volume [m3]                       : '); Readln(VolumeFinal);
  Writeln;
  i := 0;
  deltaTb := 0.5;

```

```

repeat
  i := i+1;

  Cplijn (Tb,Xstart[1],AA,BB);      {T als functie van X bepalen}

  for Eqi := 1 to Eq do
    begin
      ErrXAbs[Eqi] := AbsErr;
      ErrXRel[Eqi] := RelErr;
    end;

  GRKSetUpProblem (Eq, ReacConvEqs, ErrXAbs, ErrXRel, ReacConv);

  VolumeStart := 0;
  VolumeDelta := (VolumeFinal - VolumeStart)/Deel;
  Ready1      := false;

  repeat
    VolumeEnd := VolumeStart + VolumeDelta;

    GRKFromToUsing(VolumeStart, XStart, VolumeEnd,
                   XEnd, ReacConv);

    if Ready2 = false then
      write('Tb [K] : ',Tb:9:6)
    else
      write('Volume [m3]: ', VolumeEnd:4:2);
      write('      X : ', XEnd[1]:7:5);
      writeln('      T [K] : ', BB+AA*XEnd[1]:9:6);
      if abs(VolumeFinal-VolumeEnd)<0.5*abs(VolumeDelta) then
        Ready1 := true
      else
        begin
          XStart      := XEnd;
          VolumeStart := VolumeEnd;
        end;
  until Ready1 or keypressed;
  if (i>=2) then
    begin
      if (XEnd[1]-Xold)<0 then deltaTb := -0.5*deltaTb;
    end;
  Xold := XEnd[1];
  Tb   := Tb+deltaTb;
  if (abs(deltaTb)<1E-9) then
    Ready2 := true;
until Ready2 or keypressed;
end.

{<<< einde hoofdprogramma >>>}

```

Biilage 5, 6 en 7: Voorbeeldberekeningen warmtewisselaars.

Symbolenlijst berekening warmtewisselaars

ΔT_{lm}	Logarithmic mean Temperature difference
T	Inlet shell-side temperature
T ₁	
T	Outlet shell-side temperature
T ₂	
t	Inlet tube-side temperature
t ₁	
t	Outlet tube-side temperature
t ₂	
U	Overall heat-transfer coefficient
Q	Heat transferred in unit time
A	Heat transfer area
L	Tube length
d _o	Tube outside diameter
d _i	Tube inside diameter
p _t	Tube pitch
N _t	Number of tubes
D _b	Bundle diameter
D _s	Shell diameter
ρ_g	Vapour density
ϕ_v	Vapour flow
u _t	Tube-side velocity
η	viscosity
Re	Reynolds number
f _f	Friction factor
ΔP_t	Tube-side pressure drop
l _b	Baffle spacing
η_w	Viscosity shell-side
W _s	Shell-side massflowrate
ρ_w	Density shell-side
A _s	Cross-flow area between tubes
G _s	Shell-side massflowrate per unit area
u _s	Shell-side velocity
d _e	Equivalent diameter
ΔP_s	Pressure drop shell-side

Bijlage 5: Berekening warmtewisselaar waterverdamer

Berekening volgens coulson and Richardson [3]

$$\delta T_{lm} := \frac{(T1 - t2) - (T2 - t1)}{\ln \left[\frac{T1 - t2}{T2 - t1} \right]} \quad \delta T_{lm} = 155.157$$

T1 = 646.4 K t1 = 380.3 K

T2 = 575.3 K t2 = 525.25 K

U = 172 W/(m² K)

Q = 17033 · 10⁶ J/hr

$$Q := \frac{Q}{3600} \quad Q = 4.731 \cdot 10^6 \text{ J/s}$$

$$A := \frac{Q}{\delta T_{lm} \cdot U} \quad A = 177.292 \text{ m}^2$$

L := 3 m do := 0.025 m pt := 0.032 m

di := 0.020 m

$$Nt := \frac{A}{\pi \cdot do \cdot L} \quad Nt = 752.451$$

$$\frac{1}{2.142}$$

$$Db := do \cdot \left[\frac{Nt}{0.319} \right] \quad Db = 0.939 \quad D_s := 1.05 \text{ m}$$

Tube side pressure drop

$$\rho_g := \frac{4.53939 + 5.10018}{2} \quad \rho_g = 4.82 \quad \text{kg/m}^3$$

$$\phi_v := \frac{12121.9 + 10789.1}{2 \cdot 3600} \quad \phi_v = 3.182 \quad \text{m}^3/\text{s}$$

$$u_t := \frac{\phi_v}{\frac{\pi}{4} \cdot d_i^2} \quad u_t = 13.461 \quad \text{m/s}$$

$$\eta := \frac{0.177321 + 0.161083}{2} \cdot 10^{-4} \quad \eta = 1.692 \cdot 10^{-5} \quad \text{Pa}\cdot\text{s}$$

$$Re := \frac{\rho_g \cdot u_t \cdot d_i}{\eta} \quad Re = 7.669 \cdot 10^4$$

$$j_f := 2.8 \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta P_t := \left[8 \cdot j_f \cdot \left[\frac{L}{d_i} \right] + 2.5 \right] \cdot \frac{\rho_g \cdot u_t^2}{2} \quad \Delta P_t = 2.559 \cdot 10^3 \quad \text{Pa}$$

Shell side pressure drop

$$l_b := 0.25 \quad \eta_w := 0.184979 \cdot 10^{-4}$$

$$W_s := \frac{6848.21}{3600} \quad W_s = 1.902 \quad \text{kg/s}$$

$$\rho_w := 5.14747 \quad \text{kg/m}^3$$

$$A_s := \frac{(p_t - d_o) \cdot D_s \cdot l_b}{p_t} \quad A_s = 0.057 \quad \text{m}^2$$

$$G_s := \frac{W_s}{A_s} \quad G_s = 33.128$$

$$u_s := \frac{G_s}{\rho_w} \quad u_s = 6.436 \quad \text{m/s}$$

$$d_e := \frac{1.1}{d_o} \left[p_t^2 - 0.917 \cdot d_o^2 \right] \quad d_e = 0.02$$

$$Re := u_s \cdot d_e \cdot \frac{\rho_w}{\eta_w} \quad Re = 3.553 \cdot 10^4$$

$$j_f := 4 \cdot 10^{-2}$$

$$\delta P_s := 8 \cdot j_f \cdot \frac{D_s L}{d_e^{1b}} \cdot \frac{\rho_w \cdot u_s^2}{2} \quad \delta P_s = 2.167 \cdot 10^4 \text{ Pa}$$

Water in pipes

$$\rho_w := 910.059$$

$$\eta_w := 0.258938 \cdot 10^{-3}$$

$$u_s := \frac{G_s}{\rho_w} \quad u_s = 0.036$$

$$Re := \rho_w \cdot u_s \cdot \frac{d_e}{\eta_w} \quad Re = 2.538 \cdot 10^3$$

$$j_f := 6 \cdot 10^{-2}$$

$$\delta P_s := 8 \cdot j_f \cdot \frac{D_s L}{d_e^{1b}} \cdot \frac{\rho_w \cdot u_s^2}{2} \quad \delta P_s = 183.822$$

Bijlage 6: Berekening warmtewisselaar opwarmers/afkoelers

Berekening volgens Coulson and Rischardson [3]

$$\delta T_{lm} := \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left[\frac{T_1 - t_2}{T_2 - t_1} \right]} \quad \delta T_{lm} = -99.745$$

T1 ≡ 541.321 K t1 ≡ 664.624 K

T2 ≡ 570 K t2 ≡ 646.368 K

U ≡ 100 W/(m² K)

Q ≡ -4490.03 · 10⁶ J/hr

$$Q := \frac{Q}{3600} \quad Q = -1.247 \cdot 10^6 \text{ J/s}$$

$$A := \frac{Q}{\delta T_{lm} \cdot U} \quad A = 125.042 \text{ m}^2$$

L := 3 m do := 0.025 m pt := 0.032 m

di := 0.020 m

$$Nt := \frac{A}{\pi \cdot do \cdot L} \quad Nt = 530.696$$

$$Db := do \cdot \left[\frac{1}{2.142} \cdot \frac{Nt}{0.319} \right] \quad Db = 0.797 \quad D_s := 0.9 \text{ m}$$

Tube side pressure drop

$$\rho_g := \frac{5.46341 + 5.10372}{2} \quad \rho_g = 5.284 \quad \text{kg/m}^3$$

$$\phi_v := \frac{10071.7 + 10781.4}{2 \cdot 3600} \quad \phi_v = 2.896 \quad \text{m}^3/\text{s}$$

$$u_t := \frac{\phi_v}{\frac{\pi \cdot d_i^2}{4} \cdot N_t} \quad u_t = 17.372 \quad \text{m/s}$$

$$\eta := \frac{0.173027 + 0.158086}{2} \cdot 10^{-4} \quad \eta = 1.656 \cdot 10^{-5} \quad \text{Pa}\cdot\text{s}$$

$$Re := \rho_g \cdot u_t \cdot \frac{d_i}{\eta} \quad Re = 1.109 \cdot 10^5$$

$$j_f := 2.7 \cdot 10^{-3}$$

$$\delta Pt := \left[8 \cdot j_f \cdot \left[\frac{L}{d_i} \right] + 2.5 \right] \cdot \frac{\rho_g \cdot u_t^2}{2} \quad \delta Pt = 4.576 \cdot 10^3 \quad \text{Pa}$$

Shell side pressure drop

$$l_b := 0.25 \quad \eta_w := 0.149146 \cdot 10^{-4}$$

$$W_s := \frac{43485.1}{3600} \quad W_s = 12.079 \quad \text{kg/s}$$

$$\rho_w := 57.2129 \quad \text{kg/m}^3$$

$$A_s := \frac{(p_t - d_o) \cdot D_s \cdot l_b}{p_t} \quad A_s = 0.049 \quad \text{m}^2$$

$$G_s := \frac{W_s}{A_s} \quad G_s = 245.419$$

$$u_s := \frac{G_s}{\rho_w} \quad u_s = 4.29 \quad \text{m/s}$$

$$de := \frac{1.1}{do} \left[pt^2 - 0.917 \cdot do^2 \right] \quad de = 0.02$$

$$Re := us \cdot de \cdot \frac{\rho_w}{\eta_w} \quad Re = 3.264 \cdot 10^5$$

$$jf := 2.8 \cdot 10^{-2}$$

$$\delta Ps := 8 \cdot jf \cdot \frac{Ds L}{de^{1b}} \cdot \frac{\rho_w \cdot us^2}{2} \quad \delta Ps = 6.419 \cdot 10^4 \text{ Pa}$$

Water in pipes

$$\rho_w := 910.059$$

$$\eta_w := 0.258938 \cdot 10^{-3}$$

$$us := \frac{Gs}{\rho_w} \quad us = 0.27$$

$$Re := \rho_w \cdot us \cdot \frac{de}{\eta_w} \quad Re = 1.88 \cdot 10^4$$

$$jf := 6 \cdot 10^{-2}$$

$$\delta Ps := 8 \cdot jf \cdot \frac{Ds L}{de^{1b}} \cdot \frac{\rho_w \cdot us^2}{2} \quad \delta Ps = 8.647 \cdot 10^3$$

Bijlage 7: Berekening warmtewisselaar koeler restwarmte.

Berekening volgens Coulson and Richardson [3]

$$\delta T_{lm} := \frac{(T1 - t2) - (T2 - t1)}{\ln \left[\frac{T1 - t2}{T2 - t1} \right]} \quad \delta T_{lm} = -40.276$$

T1 ≡ 313.637 K t1 ≡ 400.327 K

T2 ≡ 380.327 K t2 ≡ 384.702 K

U ≡ 170 W/(m² K)

Q ≡ -7196.11 · 10⁶ J/hr

$$Q := \frac{Q}{3600} \quad Q = -1.999 \cdot 10^6 \text{ J/s}$$

$$A := \frac{Q}{\delta T_{lm} \cdot U} \quad A = 291.941$$

L := 6 m do := 0.025 m pt := 0.032 m

di := 0.020 m

$$Nt := \frac{A}{\pi \cdot do \cdot L} \quad Nt = 619.518$$

$$\frac{1}{2.142}$$

$$Db := do \cdot \left[\frac{Nt}{0.319} \right] \quad Db = 0.857 \quad Ds := 0.95 \text{ m}$$

Tube side pressure drop

$$\rho_g := \frac{5.77066 + 7.68128}{2}$$

$$\rho_g = 6.726 \quad \text{kg/m}^3$$

$$\phi_v := \frac{5412.18 + 5830.48}{2 \cdot 3600}$$

$$\phi_v = 1.561 \quad \text{m}^3/\text{s}$$

$$u_t := \frac{\phi_v}{\frac{\pi \cdot d_i^2}{4}}$$

$$u_t = 8.023 \quad \text{m/s}$$

$$\eta := \frac{0.113425 + 0.116262}{2} \cdot 10^{-4}$$

$$\eta = 1.148 \cdot 10^{-5} \quad \text{Pa}\cdot\text{s}$$

$$Re := \rho_g \cdot u_t \cdot \frac{d_i}{\eta}$$

$$Re = 9.397 \cdot 10^4$$

$$j_f := 2.7 \cdot 10^{-3}$$

$$\Delta P_t := \left[8 \cdot j_f \cdot \left[\frac{L}{d_i} \right] + 2.5 \right] \cdot \frac{\rho_g \cdot u_t^2}{2}$$

$$\Delta P_t = 1.944 \cdot 10^3 \quad \text{Pa}$$

Shell side pressure drop

$$lb := 0.15$$

$$\eta_w := 0.459851 \cdot 10^{-3}$$

$$W_s := \frac{25678.4}{3600} \quad W_s = 7.133 \quad \text{kg/s}$$

$$\rho_w := 942.3435 \quad \text{kg/m}^3$$

$$A_s := \frac{(pt - do) \cdot D_s \cdot lb}{pt} \quad A_s = 0.031 \quad \text{m}^2$$

$$G_s := \frac{W_s}{A_s} \quad G_s = 228.825$$

$$u_s := \frac{G_s}{\rho_w} \quad u_s = 0.243 \quad \text{m/s}$$

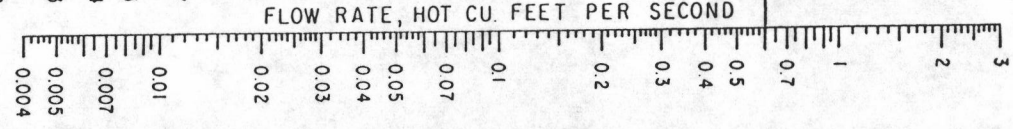
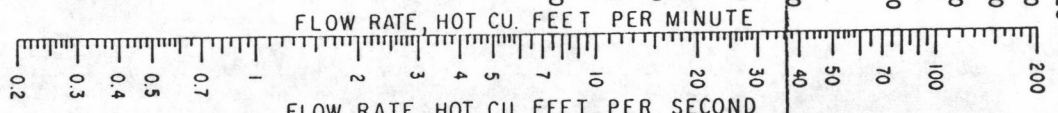
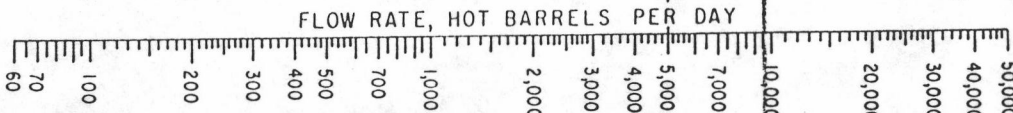
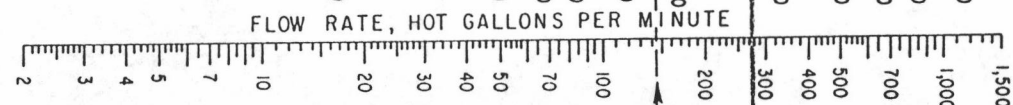
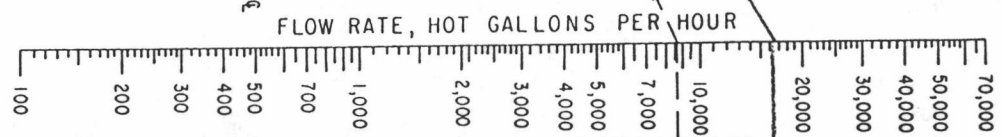
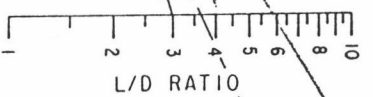
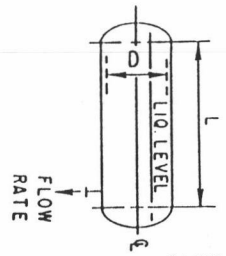
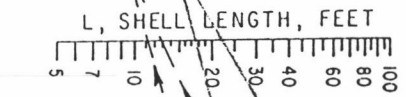
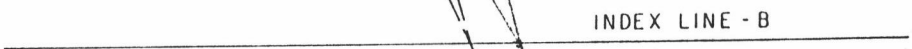
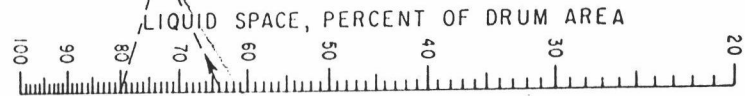
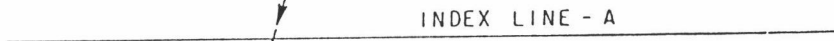
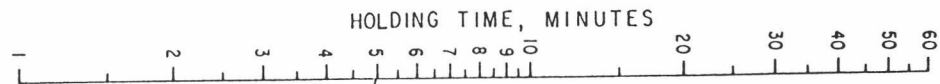
$$d_e := \frac{1.1}{do} \cdot \left[pt^2 - 0.917 \cdot do^2 \right] \quad d_e = 0.02$$

$$Re := u_s \cdot d_e \cdot \frac{\rho_w}{\eta_w} \quad Re = 9.872 \cdot 10^3$$

$$j_f := 5 \cdot 10^{-2}$$

$$\Delta P_s := 8 \cdot j_f \cdot \frac{D_s L}{de \cdot lb} \cdot \frac{\rho_w \cdot u_s^2}{2} \quad \Delta P_s = 2.129 \cdot 10^4 \quad \text{Pa}$$

Bijlage 8: Nomogram voor de dimensionering van een
horizontaal flashvat.



FLOW INDEX LINES

gecompliceerde H₂ toevoerregeling

H₂/tolueen = 10/1 molaire

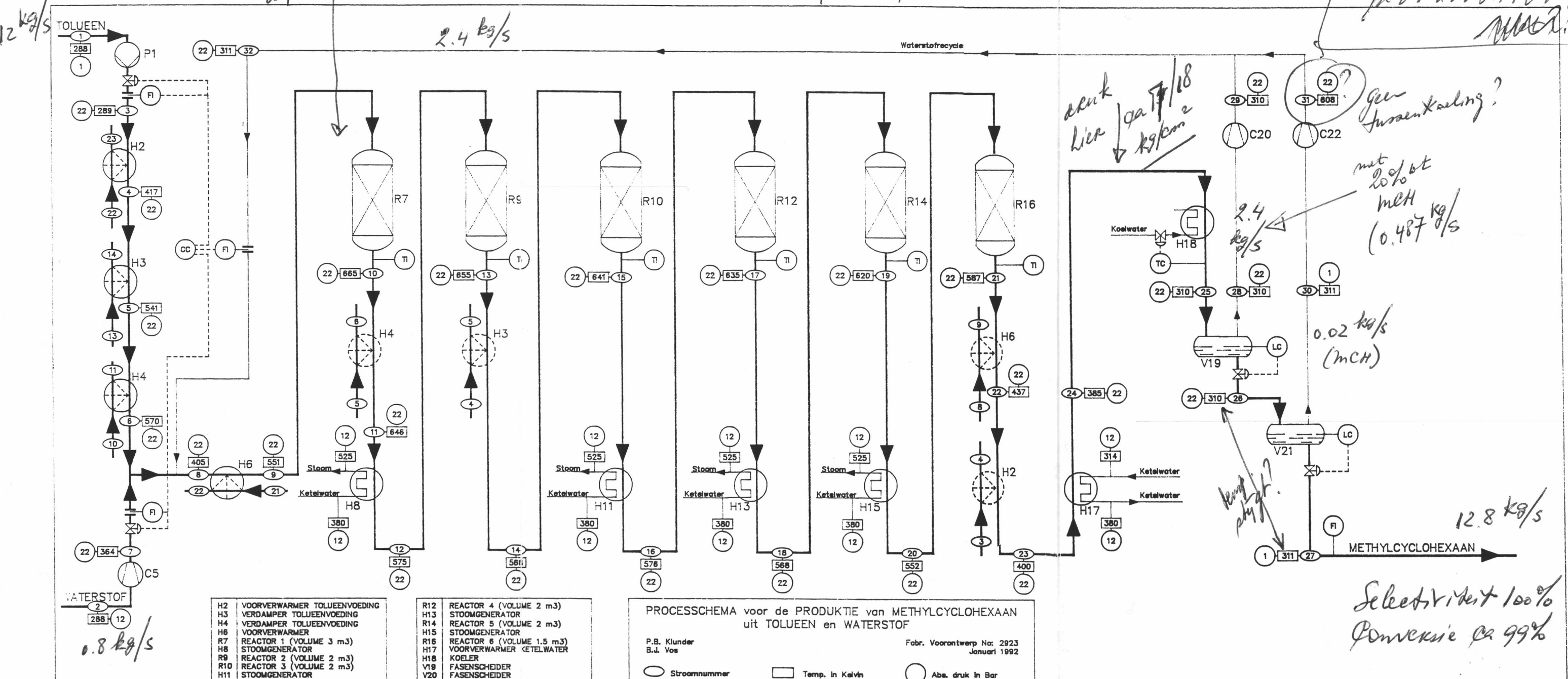
geen drukval purge drukregeling

Reactor inl. wtl. temp ΔT

551	575	566	576	565	552
605	655	641	635	620	587
	80	75	59	55	35

665K = 392°C
552 = 279°C

ho te zien zijn
inlaat temp erg laag
getref. MAX looet = 538°C
uitlaat temp ook laag!
regelbaar reactie mat?



- | | | | |
|-----|------------------------------|-----|---------------------------|
| H2 | VOORVERWARMER TOLUEENVOEDING | R12 | REACTOR 4 (VOLUME 2 m3) |
| H3 | VERDAMPER TOLUEENVOEDING | H13 | STOOMGENERATOR |
| H4 | VERDAMPER TOLUEENVOEDING | R14 | REACTOR 5 (VOLUME 2 m3) |
| H6 | VOORVERWARMER | H15 | STOOMGENERATOR |
| R7 | REACTOR 1 (VOLUME 3 m3) | R16 | REACTOR 6 (VOLUME 1.5 m3) |
| H8 | STOOMGENERATOR | H17 | VOORVERWARMER KETELWATER |
| R9 | REACTOR 2 (VOLUME 2 m3) | H18 | KOELER |
| R10 | REACTOR 3 (VOLUME 2 m3) | V19 | FASENSCHIEDER |
| H11 | STOOMGENERATOR | V20 | FASENSCHIEDER |

PROCESSHEMA voor de PRODUKTIE van METHYLCYCLOHEXAAN uit TOLUEEN en WATERSTOF

P.B. Klunder
B.J. Vos

Fabr. Voorontwerp No: 2923
Januari 1992

○ Stroomnummer □ Temp. in Kelvin ○ Abs. druk in Bar

druk hier 17/18 kg/cm²

geen tussenkooling?

temp. physisch?

gecompliceerde H₂ toevoer regeling

H₂/toluene = 10/1 molar

geen drukval

purge druk regeling

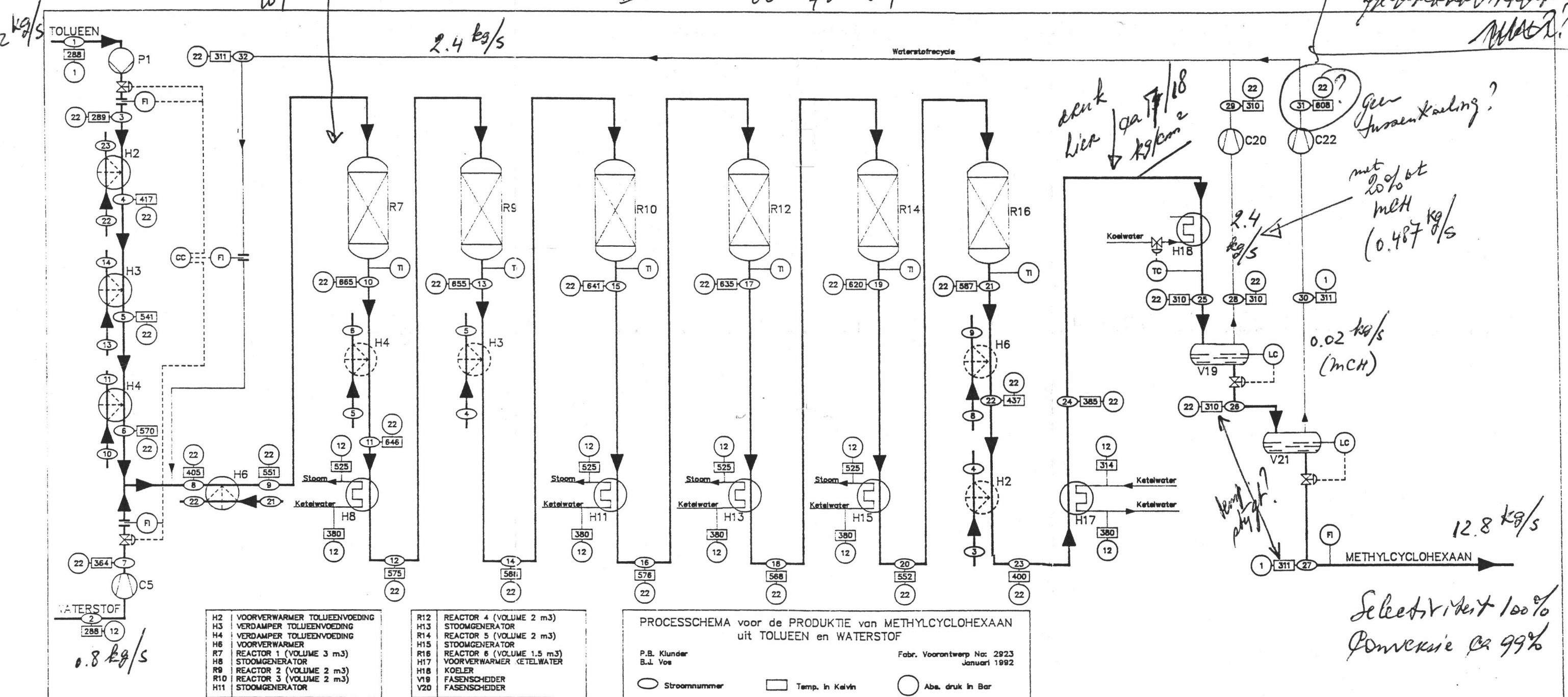
reactor ml. wtl. temp ΔT

551	575	566	576	565	552
605	655	641	635	620	587
80	75	59	55		

665K = 392°C
552 = 279°C

35 → total ΔT = 304°C!

ho te zien zijn
inlaat temp erg laag
outlet, MAX 1000°F = 538°C
inlaat temp ~~is~~ laag!
geel...
wat?



- | | | | |
|-----|---------------------------|-----|---------------------------|
| H2 | VOORWARMER TOLUEENVOEDING | R12 | REACTOR 4 (VOLUME 2 m3) |
| H3 | VERDAMPER TOLUEENVOEDING | H13 | STOOMGENERATOR |
| H4 | VERDAMPER TOLUEENVOEDING | R14 | REACTOR 5 (VOLUME 2 m3) |
| H6 | VOORWARMER | H15 | STOOMGENERATOR |
| R7 | REACTOR 1 (VOLUME 3 m3) | R16 | REACTOR 6 (VOLUME 1.5 m3) |
| H8 | STOOMGENERATOR | H17 | VOORWARMER KETELWATER |
| R9 | REACTOR 2 (VOLUME 2 m3) | H18 | KOELER |
| R10 | REACTOR 3 (VOLUME 2 m3) | V19 | FASENSCHEIDER |
| H11 | STOOMGENERATOR | V20 | FASENSCHEIDER |

PROCESSHEMA voor de PRODUKTIE van METHYLCYCLOHEXAAN uit TOLUEEN en WATERSTOF

P.B. Klunder
B.J. Vos

Fabr. Voorontwerp No: 2923
Januari 1992

○ Stroomnummer □ Temp. in Kelvin ○ Abs. druk in Bar

druk hier 17/18
kg/cm²

geen tussenkooling?

met 20% wt mCH (0.487 kg/s)

0.02 kg/s (mCH)

Selectiviteit 100%
Conversie ca 99%