

4 maart 9.30

**FVO Nr.**

**3186**

**Fabrieksvoorontwerp**

**Vakgroep Chemische Procestechologie**

***Onderwerp***

De enzymatische productie van 100 t/a mandelonitril uit HCN en benzaldehyde met optimale reactor configuratie

***AuteursTelefoon***

Sander  
Sonja  
Kwin  
Mei

S.B (Sander) Boekenoogen	(020) 6998461
S.M (Sonja) Klooster	(015) 2157333
K.Q (Quyen) Le	(015) 2616278
M. (Mei) Sha	(015) 2566381

***Keywords***

(R)-mandelonitril, enzymatische conversie, continu twee-fase proces

**Datum opdracht:** 17 september, 1996

**Datum verslag:** 20 december, 1996

**TU Delft**

**Faculteit der Scheikundige Technologie en der Materiaalkunde**

Technische Universiteit Delft

**FVO Nr.**

**3186**

Fabrieksvoorontwerp

Vakgroep Chemische Procestechnologie

*Onderwerp*

De enzymatische produktie van 100 t/a mandelonitril uit HCN en benzaldehyde met optimale reactor configuratie

*AuteursTelefoon*

S.B (Sander) Boekenoogen	(020) 6998461
S.M (Sonja) Klooster	(015) 2157333
K.Q (Quyen) Le	(015) 2616278
M. (Mei) Sha	(015) 2566381

*Keywords*

(R)-mandelonitril, enzymatische conversie, continu twee-fase proces

**Datum opdracht:** 17 september, 1996

**Datum verslag:** 20 december, 1996

## Voorwoord

Hierbij willen we de volgende personen graag bedanken die ons geholpen hebben dit procesontwerp tot een goed einde te brengen:

ir. A.A. Boogert	(BPT)
ir. R. Hartman	(CPT)
ir. C.J. Luteijn	(CPT)
ir. A. Muller	(OC)
prof. dr. J. Schoonman	(ACT)
prof. dr. Ir. J. de Swaan Arons	(ACT)
dr. ir. A.J.J. Straathof	(BPT)
ing M.E.A.M. Thijs-Krijnen	(CPT)

## Samenvatting

Dit fabrieksvoorontwerp heeft als doelstelling een technisch en economisch haalbaar procesontwerp met optimale reactor configuratie voor de enzymatische productie van R-mandelonitril uit waterstofcyanide en benzaldehyde te ontwikkelen.

Dit procesontwerp moet voorzien in een productiecapaciteit van 100 ton per jaar, een zuiverheid van 98% en een ee-waarde<sup>\*1</sup> van 0.98.

Naast de enzymatische reactie vindt ook een (ongewenste) chemische niet-enantioselectieve omzetting plaats die R- én S-mandelonitril levert. Deze reactie verlaagt de ee-waarde van het geleverde produkt en moet daarom zo veel mogelijk onderdrukt worden. Dit kan gerealiseerd worden door zowel de benzaldehyde concentratie als de pH in de waterige fase laag te houden. Door de instabiliteit van het mandelonitril boven de 40 °C mag de produktstroom nergens in het proces aan een temperatuur boven deze waarde worden blootgesteld.

Er dient een keuze gemaakt te worden tussen een drietal procesopties, namelijk een batch reactor, een fed-batch reactor en een CSTR. Hierbij wordt voor het batch- en continu proces uitgegaan van een twee-fase systeem bestaande uit een organische en een waterige fase.

Er is gekozen voor het continue twee-fase proces met een continue doorvoer van het enzym. Het procesontwerp voorziet in een productiecapaciteit van 103 ton per jaar met een zuiverheid en een ee-waarde van respectievelijk 98.2% en 0.98.

Het ontwerp van de opwerkingsprocedure heeft naast de hoofdproduktstroom een tweede produktstroom van zuiver bariumfluoride opgeleverd met een jaarproductie van 155 ton. Dit brengt een extra inkomstenbron met zich mee.

De netto winst van het proces bedraagt, uitgaande van een afschrijving over tien jaar, drie miljoen gulden per jaar. De "Return Of Investment" en de "Pay Out Time" bedragen respectievelijk 64.64% en 0.977 jaar.

De doelstelling om een technisch en economisch haalbaar procesontwerp te ontwikkelen waarbij wordt voldaan aan alle gestelde eisen is hierbij bereikt.

$$*1 \quad ee = \frac{[R]-[S]}{[R]+[S]}$$

Investerings? en IRR

HSE aspecten

Beschikbaarheid

Waarom continu?

Oud/nieuw proces

$$100 \text{ ton} / 8000 \text{ um} = \frac{1000}{80} \text{ kg/hr} = 125 \text{ kg/hr}$$

## Inhoudsopgave

1	Inleiding .....	5
2	Algemene uitgangspunten van het proces .....	7
2.1	Inleiding .....	7
2.2	Bepalen van het proces voor en nadelen .....	8
2.2.1	Twee-fase batch proces .....	8
2.2.2	Fedbatch proces .....	9
2.2.3	Twee-fase continu proces .....	10
2.2.4	De keuze .....	10
2.3	Beschrijving globale conversie van grondstoffen naar produkten .....	11
2.4	Keuze van de procesroute .....	12
2.5	Overige uitgangspunten .....	15
3	Processtructuur en proces flowsheet .....	16
3.1	Inleiding .....	16
3.2	Procesbeschrijving .....	16
4	Procesflowsheet- en apparatuurberekeningen .....	21
4.1	Enzymreactor .....	21
4.1.1	Dimensionering van de enzymreactor .....	21
4.1.2	Het toerental van de roerder .....	26
4.1.3	Warmteoverdracht in de reactor .....	27
4.1.4	De PH in de enzymreactor .....	28
4.1.5	Analyse van de karakteristieke tijden .....	30
4.1.6	Materiaalkeuze .....	32
4.1.7	Tabellen behorende bij de berekeningen van de enzymreactor .....	33
4.2	De settler .....	36
4.2.1	Dimensionering van de settler .....	36
4.2.2	Configuratie van de aan- en afvoerpijpen .....	38
4.2.3	De PH van de waterige fase in de settler .....	39
4.2.4	Materiaalkeuze .....	39
4.2.5	Tabellen behorende bij de berekeningen van de settler .....	40
4.3	Ontwerp van de ontwateringsreactor .....	42
4.4	De Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor .....	44
4.4.1	Achtergrondaspecten .....	44
4.4.2	Dimensionering van de Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor .....	45
4.5	Ontwerp van de slurymenger .....	47
4.6	Ontwerp van het citroenzuur mengvat, het NaOH mengvat en het Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> opslagvat .....	49

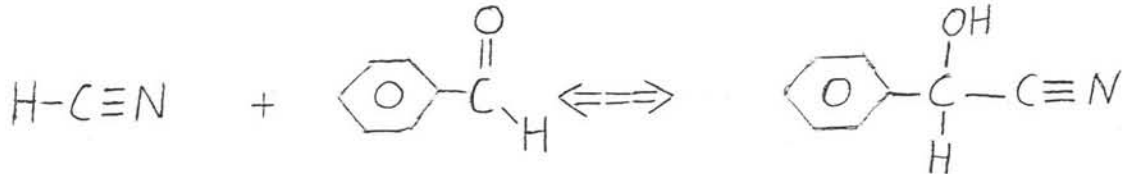
4.7	Ontwerp van de zoutfilters .....	50
4.7.1	Inleiding .....	50
4.7.2	Enzymfilter .....	50
4.7.3	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> filter .....	50
4.7.4	BaF <sub>2</sub> -filter .....	51
4.8	Ontwerp van het zoutopvangvat en de transportschroef .....	51
4.9	Ontwerp van de verdamper .....	51
4.10	Ontwerp van de destillatietorens .....	53
4.11	Ontwerp van de zeoliet-kolom .....	55
4.12	Ontwerp van de droger .....	56
4.13	Ontwerp van de warmtewisselaars .....	61
4.13.1	Warmtewisselaar .....	61
4.13.2	Condensor .....	63
4.13.3	Reboiler .....	63
4.14	Ontwerp van de pompen .....	63
4.15	Berekening van jaarproductie en zuiverheid .....	64
5	Massa- en warmtebalans .....	65
5.1	Massabalans .....	65
5.2	Warmtebalans .....	65
5.3	Totaal overzicht .....	66
6	Procesbeheersing .....	67
6.1	Inleiding .....	67
6.2	Procescontrole .....	67
7	Procesveiligheid .....	70
7.1	Inleiding .....	70
7.2	Toxische eigenschappen .....	70
7.3	Brand en explosiegevaar .....	70
7.4	Milieukundige aspecten .....	71
7.5	HAZOP-analyse .....	71
8	Economie .....	83
8.1	Inleiding .....	83
8.2	Productievolume afhankelijk kosten, K <sub>p</sub> .....	83
8.3	Semi-variabele kosten, K <sub>L</sub> .....	85
8.4	De totale investeringkosten, I <sub>tot</sub> .....	85
8.4.1	Methode van Lang .....	86
8.4.2	Methode van Taylor .....	89
8.5	De totale kosten, K <sub>T</sub> .....	91
8.6	Afschrijving en rente .....	91
8.7	Economische criteria .....	92
8.7.1	Inkomsten en "cash flow" .....	92
8.7.2	"Return On Investment", ROI .....	92
8.7.3	"Internal Rate of Return", IRR .....	93
8.7.4	"Pay Out Time", POT .....	93

---

9	Conclusie en aanbevelingen .....	94
	9.1 Conclusie .....	94
	9.2 Aanbevelingen .....	94
10	Symbolenlijst .....	96
11	Literatuurlijst .....	102
12	Bijlagen .....	104

# 1 Inleiding

Er is een grote belangstelling voor de enzymatische productie van mandelonitril. In tegenstelling tot de huidige chemische productie van mandelonitril is via de enzymatische route een hoge enantiomere excess van (R)- en (S)-mandelonitril te bereiken. Met de enzymen (R)- en (S)-hydroxynitrillyase kunnen de beide enantiomeren van mandelonitril verkregen worden. De volgende (evenwichts) reactie wordt hierbij gekatalyseerd door het enzym:



De zuivere (R) en (S) enantiomeren zijn gewilde uitgangsstoffen voor fijnchemische syntheses. Ook een groot aantal andere aldehyden kunnen met dezelfde enzymen worden omgezet tot waardevolle producten. Gedacht kan worden aan de productie van chirale LCD's, die gebruikt worden in platte beeldschermen.

Het doel van dit fabrieksvoorontwerp is om een technisch en economisch haalbaar proces voor de enzymatische productie van (R)-mandelonitril te ontwerpen. Het geleverde produkt moet hierbij voldoen aan een ee (enantiomere excess) van 0.98 en een zuiverheid van 98%. Dit proces moet in staat zijn een productiecapaciteit van 100 ton per jaar te leveren.

Een keuze zal gemaakt moeten worden tussen het gebruik van een batch reactor, een fed-batch reactor of een CSTR.

Van groot belang in het procesontwerp is het onderdrukken van de spontane niet-enantioselectieve (chemische) omzetting. Werken bij een lage pH en een lage benzaldehyde concentratie is hiertoe gewenst. In de verdere opwerking van het produkt dient ook rekening gehouden te worden met de instabiliteit van het produkt. Boven de 40°C kan namelijk ontleding van mandelonitril naar zijn uitgangsstoffen optreden.

Zowel voor het reactortype als in de verdere opwerking van de produktstromen zijn keuzes gemaakt die gebaseerd zijn op de gewenste ee, zuiverheid, praktische haalbaarheid, economische overwegingen, veiligheid en milieukwaliteitseisen.

Er is getracht om het produktopwerkingsproces zo simpel mogelijk te houden om zo het optimale compromis tussen de gewenste zuiverheid, praktische haalbaarheid en de economie van het geheel te bewerkstelligen. Het dient echter wel vermeld te worden dat in het ontwerp geprobeerd is om zoveel mogelijk uit te gaan van het 'worst case' beginsel.

*product- en opweringsanalyse*



Vooraf vanwege de extreme toxiciteit en de explosiviteit van waterstofcyanide spelen de veiligheidsaspecten een zeer grote rol. Dit uit zich dan ook in de reactor- en proceskeuze (zie hoofdstuk 2: de uitgangspunten) waar zoveel mogelijk de (eventuele) concentratie van grote hoeveelheden waterstofcyanide vermeden dient te worden. Daarom zal de voorkeur in principe uitgaan naar kleine en dus veiligheidshalve goed controleerbare processtromen.

Uiteraard dienen om zowel economische als milieutechnische redenen de afvalstromen zo klein mogelijk gehouden te worden.

---

## 2 Algemene uitgangspunten van het proces

### 2.1 Inleiding

Zoals reeds vermeld in de algemene inleiding is als doel gesteld om een procesontwerp te realiseren dat voorziet in een productiecapaciteit van 100 ton (R)-mandelonitril per jaar. Het geleverde produkt moet hierbij voldoen aan een zuiverheid van 98% en een ee van 0.98.

In dit hoofdstuk zal in eerste instantie de proceskeuze worden belicht. Een afweging zal gemaakt worden tussen batch, fed-batch en continu productie.

In het productieproces komen twee parallele reacties voor. Enerzijds de spontane niet-gekatalyseerde (chemische) reactie die zowel (R)- als (S)-mandelonitril levert, anderzijds de enzym-gekatalyseerde reactie die alleen (R)-mandelonitril levert.

Om de vereiste enantiomere selectiviteit te realiseren moet de spontane niet-gekatalyseerde reactie zoveel mogelijk onderdrukt worden. Werken bij een lage pH is één mogelijkheid hiertoe. Echter, een te lage pH zal ook ten koste gaan van de enzymatische activiteit. De ongewenste reactie kan ook onderdrukt worden door in de waterige oplossing, waar de reacties plaatsvinden, de benzaldehyde concentratie zo laag mogelijk te houden.

In het fed-batch proces kan dit gerealiseerd worden door middel van een gecontroleerde toevoer van benzaldehyde en/of waterstofcyanide aan de reactor. Voor het batch en het continu proces kan dit gerealiseerd worden door gebruik te maken van een twee-fase systeem. Hierbij verblijft de benzaldehyde in een organische fase van waaruit diffusie naar de waterige fase plaats vindt om vervolgens te reageren. Omgekeerd diffundeert het gevormde mandelonitril naar de organische fase.

Een geschikte organische fase is MTBE (Methyl-tert-Butyl-Ether). Dit oplosmiddel is totaal niet reactief en dankzij zijn lage kookpunt (55°C) eenvoudig te verwijderen.

Als tweede zal een globale beschrijving worden gegeven van alle omzettingen die in het gehele proces plaats vinden. Hier zal ook kort ingegaan worden op overige aan het (mandelonitril) reactiesysteem gerelateerde uitgangspunten.

Vervolgens zal aan de hand van een blokschema de gekozen procesroute worden beschreven en beargumenteerd.

Als laatste zal ingegaan worden op de meer algemene uitgangspunten.

---

## 2.2 Bepalen van het soort proces: voor- en nadelen

### 2.2.1 Twee-fase Batch proces

#### *Voordelen*

- \* Simpele uitvoerbaarheid
- \* Het enzym hoeft niet geïmmobiliseerd te worden wat leidt tot een hogere activiteit.
- \* Het twee-fase systeem zorgt voor een effectieve onderdrukking van de spontane chemische reactie.

#### *Nadelen*

- \* In de reactor is een grote hoeveelheid waterstofcyanide aanwezig. Aangezien dit een zeer toxische (dodelijke) en explosieve stof is dienen hoge concentraties bij voorkeur vermeden te worden.
- \* Er is in een batchproces slechts een beperkte productie mogelijk. Ophoping van het gevormde mandelonitril zal uiteindelijk leiden tot een evenwichtsinstelling door het overwicht van de teruggaande reactie.
- \* De lange verblijftijd in de batch-reactor zal leiden tot een gedeeltelijke omzetting van benzaldehyde naar benzoëzuur, deze component inhibeert het enzym en vermindert de uiteindelijke produktzuiverheid.
- \* Aangezien het enzym hier niet geïmmobiliseerd is, is het minder beschermd en instabieler. Een lange verblijftijd in combinatie met hard roeren kan alsnog activiteitsverlies veroorzaken.
- \* Een batch reactor heeft een groot volume. Dit betekent dat de reactor op zichzelf zeer veel zal gaan kosten. Daarnaast zijn ook hoge kosten te verwachten voor de koeling en voor het zorgvuldig mengen van de beide fasen. Indien de menging niet voldoende gerealiseerd kan worden ontstaan er inhomogeniteiten met een verminderde omzetting als gevolg.
- \* Een twee-fase systeem betekent een meer complexe opwerkingsprocedure. Dit kan hogere kosten veroorzaken.

### 2.2.2 Fedbatch proces

#### *Voordelen*

- \* De spontane chemische reactie kan dankzij een gecontroleerde toevoer effectiever onderdrukt worden.
- \* De startconcentraties kunnen lager zijn dan bij batch aangezien er waterstofcyanide en benzaldehyde continu kan worden toegevoegd.
- \* Het enzym hoeft niet geïmmobiliseerd te worden wat leidt tot een hogere activiteit.

#### *Nadelen*

- \* Er is in een batchproces slechts een beperkte productie mogelijk. Ophoping van het gevormde mandelonitril zal uiteindelijk leiden tot een evenwichtsinstelling door het overwicht van de teruggaande reactie.
- \* Hier is de ophoping van waterstofcyanide minder hoog dan in het batch-proces maar er zal nog altijd sprake zijn van een redelijk grote hoeveelheid. Dit is om veiligheidsoverwegingen niet aantrekkelijk.
- \* De lange verblijftijd in de batch-reactor zal leiden tot een gedeeltelijke omzetting van benzaldehyde naar benzoëzuur, deze component inhibiteert het enzym en vermindert de uiteindelijke produktzuiverheid.
- \* Aangezien het enzym hier niet geïmmobiliseerd is, is het minder beschermd en instabieler. Een lange verblijftijd in combinatie met hard roeren kan alsnog activiteitsverlies veroorzaken.
- \* Een batch reactor heeft een groot volume. Dit betekent dat de reactor op zichzelf zeer veel zal gaan kosten. Daarnaast zijn ook hoge kosten te verwachten voor de koeling en voor het zorgvuldig mengen. Indien de menging niet voldoende gerealiseerd kan worden ontstaan er inhomogeniteiten met een verminderde omzetting als gevolg.
- \* Het produkt zal in de verdere opwerking gescheiden moeten worden van het water. Aangezien water en mandelonitril beide een hoog kookpunt hebben zal scheiding d.m.v. destillatie onder de 40°C (ontledingstemperatuur van mandelonitril) lastig zijn.

### 2.2.3 Continu proces; Continue twee-fase reactor

#### *Voordelen*

- \* Door een goede keuze van de combinatie van water en organische fase kan de spontane chemische reactie effectief worden onderdrukt.
- \* In dit reactorsysteem kan met een betrekkelijk hoge pH worden gewerkt (pH=5) wat zorgt voor minder deactivatie van het enzym.
- \* Er kan gewerkt worden met betrekkelijk kleine hoeveelheden waterstofcyanide t.o.v. de batchwijze processen.
- \* Voor continu productie is een relatief kleine reactor nodig. Dit is niet alleen goedkoper, effectieve menging en koeling zal ook makkelijker gaan.
- \* Omdat uiterst kleine enzymhoeveelheden nodig zijn hoeft geen enzymrecycle ingebouwd te worden. Dit betekent dat ook de immobilisatie van het enzym overbodig is zodat activiteitsverlies door immobilisatie bespaart blijft.
- \* Door de geringe verblijftijd in een continu reactor zal geen relevant activiteitsverlies optreden.

#### *Nadelen*

- \* Een twee-fase systeem betekent een meer complexe opwerkingsprocedure. Dit kan hogere kosten veroorzaken.
- \* Het gebruik van een continu proces voor een beperkte productie van 100 ton per jaar is niet echt conventioneel.

### 2.2.4 De keuze

Een zorgvuldige beschouwing van de voor- en nadelen van respectievelijk het batch, het fed-batch en het continu proces heeft er uiteindelijk toe geleid dat de voorkeur uit gaat naar het twee-fase continu proces.

De toepassing van het tweefase systeem stond in het oorspronkelijke procesvoorstel alleen vermeld bij de batch uitvoering.. Uit literatuuronderzoek is echter gebleken dat ook toepassing van het twee-fase systeem op het continu proces uitstekende mogelijkheden zou bieden tot het behalen van een hoge opbrengst en een hoge ee.

## 2.3 Beschrijving globale conversie van grondstoffen naar produkten

In het mandelonitril productieproces vinden twee soorten reacties plaats. Namelijk:

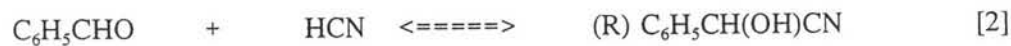
- \* een chemische, ongewenste, reactie en
- \* een enzymatische, gewenste, reactie.

*In het twee-fase systeem wordt ervan uitgegaan dat alle reacties in de waterige fase plaatsvinden. In de waterige fase dient de pH dan 5 te bedragen, dit in verband met het onderdrukken van de chemische reactie.*

De chemische, niet gekatalyseerde, evenwichtsreactie is als volgt:



De enzymatische evenwichtsreactie verloopt als volgt:

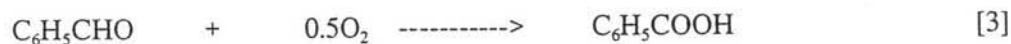


De reactiesnelheid van respectievelijk de heengaande en teruggaande chemische reactie is evenredig met de concentraties van de betrokken componenten.

De enzymatische reactie wordt beschreven volgens een zogenaamd Michaelis-Menten verband. Voor een exacte beschrijving van de kinetische reactiesnelheidsvergelijkingen wordt verwezen naar hoofdstuk 4.1.1.

Er is aangenomen dat de snelheidsbepalende stap in het omzettingsproces bepaald wordt door de enzymkinetiek, dus niet door (diffusieve) transportlimitatie. In hoofdstuk 4.1.5 zal aangetoond worden dat deze aanname ook gegrond is. Tevens is aangenomen dat enzymatische omzettingen geen warmte-effecten met zich meebrengen.

Omdat het proceswater hoogst waarschijnlijk een beperkte hoeveelheid opgelost zuurstof bevat is het denkbaar dat een klein deel van de benzaldehyde zal auto-oxideren naar benzoëzuur volgens:



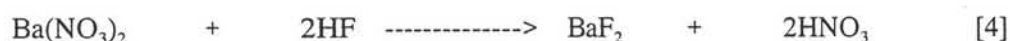
Het gevormde benzoëzuur kan het enzym inhibiteren en zal de uiteindelijke produktzuiverheid negatief beïnvloeden.

Deze reactie kan gekatalyseerd worden door metaalionen, daarom is het verstandig om de reactorwand van roestvast staal (RVS) te maken. Vanwege de beperkte verblijftijd in de reactor en omdat er vrij weinig zuurstof in het systeem zal voorkomen is het niet waarschijnlijk dat er veel benzoëzuur gevormd zal worden. Desalniettemin, het gehanteerde 'worst case' beginsel heeft er toe geleid dat er alsnog rekening mee is gehouden dat één promille van de in de reactor ingevoerde hoeveelheid benzaldehyde wordt geoxideerd tot benzoëzuur.

In het verdere opwerkingsproces komen nog twee extra omzettingen voor. Dit is enerzijds noodzakelijk om de verwijdering van een eerder toegevoegde hulpstof, waterstoffluoride, op een rendabele wijze mogelijk te maken. Anderzijds moest, om de gewenste productzuiverheid te bereiken, water verwijderd worden zonder de ontledingstemperatuur van mandelonitril, 40 °C, te overschrijden.

Het gaat hierbij om de volgende reacties:

Voor de verwijdering van waterstoffluoride:



Voor de verwijdering van water:



Voor nadere details met betrekking tot de opwerkingsprocedures behorende bij bovenstaande reacties wordt verwezen naar hoofdstuk 3.2.

## 2.4 Keuze van de procesroute

Met de keuze van het twee-fase continu reactor systeem is in feite de globale structuur van de procesroute al vastgelegd. Aan de hand van het bijbehorende blokschema (figuur 1) zullen stapsgewijs de opwerkingsprocedures worden besproken die nodig zijn om aan de gewenste productie eisen te voldoen.

(Bloknummers komen overeen met de nummering in figuur 1)

- Blok 1: Allereerst moet de aangevoerde benzaldehyde worden ontdaan van benzoëzuur door middel van destillatie om later in de reactor inhibitie van het enzym tegen te gaan.
- Blok 2: De reactor wordt gevoed met twee recyclestromen, waterstofcyanide, gezuiverd benzaldehyde, proceswater, een enzymoplossing en voor de pH-regeling, een natronloog- en citroenzuurbuffer oplossing.
- Blok 3: Het enzym uit de reactor effluentstroom wordt verwijderd met behulp van een filter en afgevoerd. De stroom die door het filter heengaat wordt naar de settler geleid. Aan deze stroom wordt zwavelzuur toegevoegd om de chemische ongewenste reactie volledig te onderdrukken. De hoeveelheid zwavelzuur moet zodanig zijn dat de pH, in de waterige fase, 3 wordt.
- Blok 4: Vervolgens moeten de waterige fase en de organische fase van elkaar gescheiden worden in een settler.

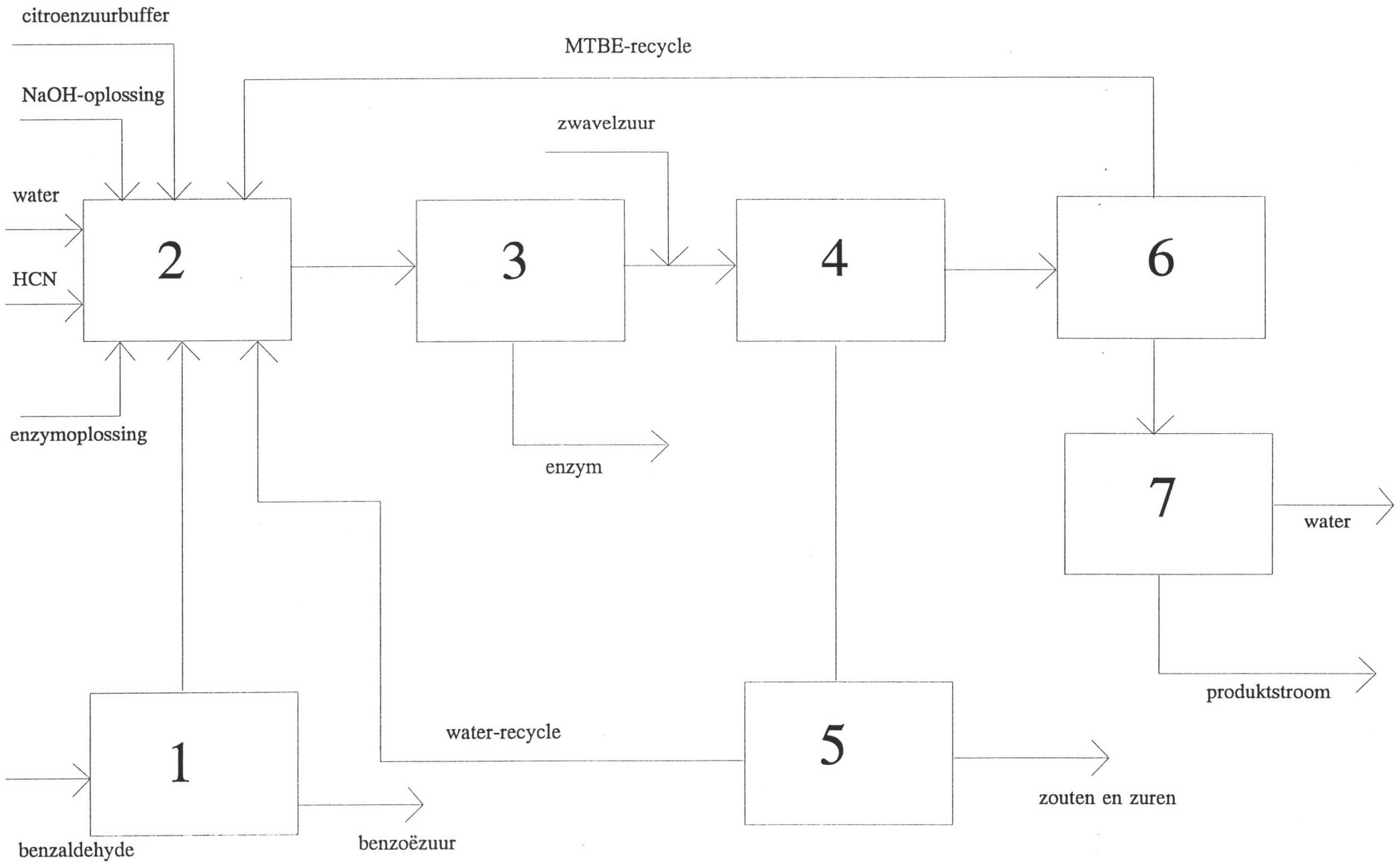
- 
- Blok 5: De waterige fase wordt door afdampen gescheiden van zouten en zuren om vervolgens gerecycled te worden naar de reactor.
- Blok 6: De organische fase moet vervolgens gescheiden worden in een produktstroom die mandelonitril, zwavelzuur en benzoëzuur bevat en een stroom bestaande uit MTBE, waterstofcyanide, benzaldehyde en een kleine hoeveelheid water. Deze laatste stroom wordt gerecycled naar de reactor. Deze produktzuivering kan uitgevoerd worden met behulp van destillatie. Uiteraard dient in acht genomen te worden dat de temperatuur hierbij niet boven de ontledings-temperatuur van mandelonitril, 40 °C, mag uitkomen.
- Blok 7: De produktstroom uit de destillatiekolom zal nog een kleine hoeveelheid water bevatten. Om de gewenste zuiverheid van 98% te halen moet het water nog apart verwijderd worden.

Bovenstaande beschrijving geeft slechts globaal de keuze van de procesroute aan. Om aan de gewenste produktie eisen te voldoen dienen in de uitwerking van de processtructuur uiteraard de nodige aanpassingen verricht te worden. Met name bij de destillatie van de organische fase en in de verdere opwerking van het produkt is gebleken dat de toevoeging van hulpstoffen (waterstof-fluoride en natriumsulfaat) noodzakelijk was om de produktzuivering praktisch mogelijk te maken.

Omdat ook de gebruikte hulpstoffen weer verwijderd moeten worden zal de uiteindelijke processtructuur een stuk complexer worden dan het hier beschreven procesblokschema. Voor de uiteindelijke processtructuur en het procesflowsheet wordt verwezen naar hoofdstuk 3.



# FIGUUR 1 PROCESBLOKSCHEMA



## 2.5 Overige uitgangspunten

De overige uitgangspunten staan hieronder opgesomd:

- \* Bij voorkeur dient de fabriek gesitueerd te worden in de buurt van een waterstofcyanide producerende fabriek. Op deze manier is een directe aanvoer van waterstofcyanide mogelijk zodat geen opslag nodig is. Dit is bevorderlijk voor de procesveiligheid. Bekend is dat DSM in Geleen (Limburg) waterstofcyanide produceert.
- \* In een jaar wordt gedurende 8150 uur continu geproduceerd.
- \* De "plant" wordt over 10 jaar afgeschreven.
- \* De temperatuur van de buitenlucht is gesteld op 20°C, de luchtvochtigheid bedraagt 70%.
- \* De temperatuur van de proceslucht, gebruikt voor het drogen, is gesteld op 25°C en de luchtvochtigheid bedraagt 70%
- \* Koelwater is beschikbaar op 20°C.
- \* Stoom wordt geacht beschikbaar te zijn ter plaatse van de gebruiker bij de hieronderstaande absolute drukken en temperaturen:
  - hoge druk (40 bar, 410 °C), condensatietemperatuur: 250°C
  - middendruk (10 bar, 180 °C), condensatietemperatuur: 180°C
  - lage druk (3 bar, 190°C), condensatietemperatuur: 133.5°C
- \* Lage druk stoom kost Fl 30,- per ton.
- \* Hoge druk stoom kost FL 35,- per ton.
- \* Koelwater kost Fl 0,10- per m<sup>3</sup>.
- \* Koelwater heeft een ontwerp inlaat-temperatuur van 20°C en een maximaal toelaatbare uitlaat-temperatuur van 40°C.
- \* Proceswater kost Fl 2,50- per m<sup>3</sup>.
- \* Brine water kost Fl0,40- per m<sup>3</sup>.
- \* Brinewater heeft een ontwerp inlaat-temperatuur van 20°C en een maximaal toelaatbare uitlaat-temperatuur van 40°C.
- \* Electriciteitskosten bedragen Fl 0,13- per 10<sup>6</sup> kWh/j.
- \* Electriciteit is beschikbaar op 220 V wisselspanning.
- \* Een overzicht van alle in het proces betrokken componenten inclusief kosten en fysische eigenschappen staat in bijlage 3<sup>A-F</sup>.

## 3 Processtructuur en Procesflowsheet

### 3.1 Inleiding

Aan de hand van het procesflowsheet (bijlage 1) zal een gedetailleerde beschrijving worden gegeven van de processtructuur. Hierbij zullen de verschillende "unit operations" verantwoord worden. Tevens zal de keuze van de procescondities en het gebruik van de hulpstoffen toegelicht worden.

Hieronder volgen nog enkele mededelingen met betrekking tot de toegepaste thermodynamica:

Bij het gebruik van het computersimulatieprogramma Chemcad is uitgegaan van het thermodynamische model volgens UNIFAC. Dit model is van toepassing op een twee-fase systeem en gaat uit van een niet-ideale situatie. De groepscontributie methode die UNIFAC hanteert en het voorspellende karakter maakt UNIFAC uitermate geschikt voor het definiëren van nieuwe componenten. Omdat de component mandelonitril apart gedefinieerd moest worden in Chemcad was dit zeer essentieel.

Voor de gehanteerde thermodynamische uitgangspunten bij de berekeningen van de energiebalansen wordt verwezen naar hoofdstuk 5.2. Zoals reeds eerder vermeld is, is ervan uitgegaan dat er bij de enzymatische omzetting geen reactiewarmte vrijkomt.

### 3.2 Procesbeschrijving

Hieronder volgt de beschrijving van de processtructuur:

Omdat benzoëzuur het enzym inhibiteert moet de benzaldehyde grondstof eerst worden ontdaan van deze component in de benzaldehyde destillatiekolom (T27). Om de vorming van 'heavy ends' in de kolom tegen te gaan moet de bodemtemperatuur onder de 180 °C blijven, ook de toptemperatuur mag niet de 150 °C overschrijden. Daarom dient deze destillatie onder vacuum uitgevoerd te worden (0.15 bar) om de scheiding tussen benzaldehyde en benzoëzuur praktisch uitvoerbaar te maken.

Het gezuiverde benzaldehyde dat de top van de kolom verlaat op een temperatuur van 116 °C wordt na koeling tot 22 °C verpompt naar de enzymreactor (R22). De bodemstroom op een temperatuur van 135 °C wordt na koeling tot 22 °C afgevoerd als afvalstroom.

In de enzymreactor (R22) moet de temperatuur op 22 °C gehouden worden om produktontleding te voorkomen. Ook dient de pH in de waterige fase op 5 gehouden te worden om de chemische ongewenste reactie te onderdrukken. Voor de pH-regeling wordt gebruik gemaakt van een natronloog-oplossing in combinatie met een citroenzuur-oplossing. Omdat de citroenzuur ook als taak heeft de oplosbaarheid van benzaldehyde in de waterige fase te vergroten wordt een relatief grote overmaat van deze component toegevoegd.

Water en MTBE dat aan de enzymreactor (R22) wordt toegevoegd is voor het grootste deel afkomstig van de recyclestromen. De recyclestromen bevatten tevens waterstofcyanide en benzaldehyde. Daarnaast is er een voortdurende aanvoer van "vers" waterstofcyanide, gezuiverd benzaldehyde en water.

Het aan de enzymreactor (R22) toegevoegde enzym wordt uit de reactoreffluentstroom verwijderd met behulp van een membraanfilter (F26A/B). Dit filter wordt om de 24 uur gewisseld en van zijn filterkoek ontdaan.

Vervolgens wordt aan het twee-fase-mengsel uit de enzymreactor zwavelzuur toegevoegd. Dit om de pH in de waterige fase op 3 te brengen zodat de ongewenste chemische reactie volledig onderdrukt wordt en dus de enantiomere selectiviteit behouden blijft. De hieropvolgende settler (V38) scheidt de beide fasen van elkaar. Volgens de simulatie in Chemcad komt nog opvallend veel water in de organische fase terecht (12.8 kg water in 83.7 kg MTBE). Dit zou toegeschreven kunnen worden aan de aanwezigheid van mandelonitril, deze component zou in dat geval de oplosbaarheid van water in MTBE aanzienlijk verhogen.

De waterige fase wordt vervolgens afgevoerd naar een verdamper (V39) waar het water gezuiverd wordt van natriumzouten, citroenzuur en benzoëzuur. De zoutslurry (101 °C, 1bar) die uit de bodem van de verdamper afkomstig is wordt afgekoeld tot 22 °C en is een afvalstroom. Het gasmengsel (bestaande uit water/HCN/benzaldehyde/MTBE) welke uit de top van de verdamper afkomstig is (101 °C, 1bar) wordt gecondenseerd en op een temperatuur van 22 °C gebracht waarna het wordt doorgevoerd naar het water regelvat (V42). Van hieruit wordt het water inclusief de overige componenten gerecycled naar de enzymreactor (R22). Er is overigens aangenomen dat alle in de waterige fase aanwezige mandelonitril in de verdamper zal ontleden vanwege de instabiliteit van het produkt ("worst case"-benadering).

De organische fase uit de settler (V38) wordt na toevoeging van een waterstoffluoride-oplossing in de mandelonitrilkolom (T47) geleid. In deze destillatie dient mandelonitril in combinatie met een deel water, zwavelzuur en benzoëzuur gescheiden te worden van MTBE, HCN, waterstoffluoride, benzaldehyde en het grootste deel water. De kolom moet onder hoog vacuum (0.05 bar) werken om de ontledingstemperatuur van mandelonitril (40 °C) niet te overschrijden. De bodemstroom met het produkt verlaat de kolom bij een temperatuur van 30 °C. De topstroom bevindt zich op een temperatuur van -11 °C. Condensatie van de topstroom wordt uitgevoerd met behulp van een vloeibaar-stikstof koeling.

Omdat door de verwijdering van mandelonitril niet gegarandeerd kan worden dat de hoeveelheid water in de topstroom tijdens en na de condensatie volledig opgelost zal blijven in de MTBE moest rekening gehouden worden met de mogelijkheid van ijsafzetting in de leidingen en in de topcondensor. Waterstoffluoride (HF) is daarom toegevoegd om de nodige vriespuntsdaling van het water te garanderen. In principe is de vriespuntsdaling van het water niet afhankelijk van de soort component die toegevoegd zal worden maar enkel van de hoeveelheid die van een bepaalde component in het water terecht komt.

De vriespuntsdaling van het water kan berekend worden met:

$$\Delta T = K_f \cdot m_c \quad (1)$$

Hierin geldt:	$\Delta T$	:	vriespuntsdaling	[°C]
	$m_c$	:	molariteit toegevoegde component	[mol/l]
	$K_f$	:	cryoscopische constante	[K*l/mol]

Er is voor de toevoeging van HF gekozen omdat deze de scheiding van de andere componenten niet bleek te beïnvloeden, terwijl HF zelf dankzij zijn lage kookpunt vrij makkelijk te verwijderen is. Extra HCN toevoegen in plaats van HF bleek geen optie. Er kon namelijk niet gegarandeerd worden dat, indien ontmenging van het water zou optreden, dan ook daadwerkelijk al de toegevoegde HCN in het ontmengde water terecht zal komen en niet in de MTBE. Verwacht mag worden dat, indien het toegevoegde (zeer polaire HF) volledig in de MTBE zou oplossen, ook het water in de MTBE opgelost blijft.

Met de drie kg HF die wordt toegevoegd en terecht komt in een hoeveelheid water van 8.5758 kg is uit te rekenen dat een vriespuntsdaling van 32.5°C gerealiseerd kan worden. In werkelijkheid zal de vriespuntsdaling nog groter zijn omdat ook wat HCN uit het MTBE in het water zal oplossen. Tevens zal ook een deel van het water opgelost blijven in het MTBE zelf.

De produktstroom uit de bodem van de mandelonitrilkolom (T47) wordt eerst gekoeld tot 22°C. Vervolgens wordt zwavelzuur toegevoegd om opgeloste natrium-ionen te binden onder vorming van natriumsulfaat. In de hieropvolgende ontwateringsreactor (R81) wordt een slurry van natriumsulfaat in mandelonitril toegevoegd om het water uit de produktstroom te verwijderen door middel van vorming van natriumsulfaat-hydraten. Aangenomen is dat hier 99% van het water verwijderd wordt.

Het natriumsulfaathydraat wordt vervolgens in een zoutfilter (F72A/B) opgevangen. Ook dit filter wordt om de 24 uur verwisseld. De zoutkoek wordt dan verwijderd en overgeheveld naar een opvangvat (M73). Aangenomen is dat het afgefilterde zout een deel van de produktstroom meeneemt dat gelijk is aan 10% van het zoutvolume. Dit komt neer op een verlies van 3% van de oorspronkelijke produktstroom.

Vanuit dit vat wordt het natte zout met behulp van een transportschroef (M73) naar een droger (M74) geleid waar het gebonden water en de overige componenten worden verwijderd. Aangenomen wordt dat mandelonitril en citroenzuur onder invloed van de hete luchtstroom (200 °C, 1 bar) ontleden en met deze lucht meegevoerd worden. Het droge zout wordt in combinatie met een deel van de watervrije produktstroom (mandelonitril) gemengd in de slurrymenger (R78) om later weer als slurry aan de ontwateringsreactor (R81) toegevoegd te worden. Omdat er sprake is van een netto produktie van natriumsulfaat zal periodiek (bijv. om het uur) droog zout gepurged moeten worden.

De produktstroom na het zoutfilter (F72A/B) wordt opgesplitst in twee stromen. De grootste stroom wordt afgevoerd als produktstroom. De kleinste stroom wordt door een zeoliet gevoerd waar het ontdaan wordt van het laatste spoortje water om vervolgens met het droge geregenereerde zout in de slurrymenger (R78) gemengd te worden. De zeolietkolom wordt om de 48 uur gewisseld en geregenereerd met hete lucht (200 °C, 1 bar).

In de laatste destillatiekolom, de HF-kolom (T56), worden MTBE en benzaldehyde gescheiden van HCN en HF in combinatie met een kleine hoeveelheid MTBE en een spoortje water (1 bar). De bodemstroom (60.2 °C) wordt gekoeld naar 22 °C en overgebracht naar het MTBE-regelvat (V64) van waaruit de MTBE recycle plaats vindt naar de enzymreactor (R22). Er is aangenomen dat de kleine hoeveelheid mandelonitril die nog meegaat in de HF-kolom volledig ontleedt.

Omdat HF en HCN een azeotroop hebben kunnen deze niet door middel van destillatie van elkaar gescheiden worden. Daarom wordt de topstroom (35 °C) uit de laatste destillatiekolom op een temperatuur van 70 °C gebracht, zodat deze geheel verdampt is, en onderin de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor geleid (R 67A/B). Hierin wordt HF in de vorm van BaF<sub>2</sub> verwijderd terwijl het gasvormige HCN en MTBE uit de reactor stromen. Het spoortje water uit de ingaande stroom blijft achter in de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor. Het gasvormige HCN en MTBE wordt gecondenseerd en overgebracht naar het MTBE-regelvat (V64) van waaruit recycle plaats vindt naar de enzymreactor (R22).

In het proces treedt een zeer klein verlies van MTBE op. Dit verlies wordt gecompenseerd door een MTBE toevoeging aan het MTBE regelvat (V64).

Hieronder volgt een meer gedetailleerde uitleg van de werking van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor en de batchgewijze opwerking hiervan:

In reactor R67A wordt bij een temperatuur van 70 °C en een druk van 1 bar het waterstoffluoride uit een stroom van gasvormig waterstoffluoride, water, waterstofcyanide en MTBE verwijderd. Dit gebeurt door waterstoffluoride te laten reageren met een geconcentreerde bariumnitraat oplossing in water, verzadigd met waterstofcyanide, tot het onoplosbare bariumfluoride en het goed oplosbare salpeterzuur. De bariumnitraat oplossing is met waterstofcyanide verzadigd om te voorkomen dat het gasvormige waterstofcyanide in het water zal oplossen. Na 48 uur is 90% van het bariumnitraat weggereageerd met waterstoffluoride tot bariumfluoride. Na deze 48 uur moet reactor R67A worden opgewerkt en wordt de tweede reactor, R67B, in gebruik genomen. De reactoren worden verwarmd met een warmwaterstroom van 80 °C.

---

De inhoud van R67A, welke water, bariumfluoride, salpeterzuur ( $\text{HNO}_3$ ), waterstofcyanide en bariumnitraat bevat, moet eerst nog acht uur bij  $70^\circ\text{C}$  en 1 bar worden gemengd met een waterstoffluoride-oplossing om de rest van het bariumnitraat om te zetten in bariumfluoride en  $\text{HNO}_3$ . Als dit gebeurt is kan de inhoud van de reactor over een tijdsbestek van 37 uur door het filter, F85, worden gepompt met P84. Deze procedure vindt ook weer plaats bij  $70^\circ\text{C}$  en 1 bar.

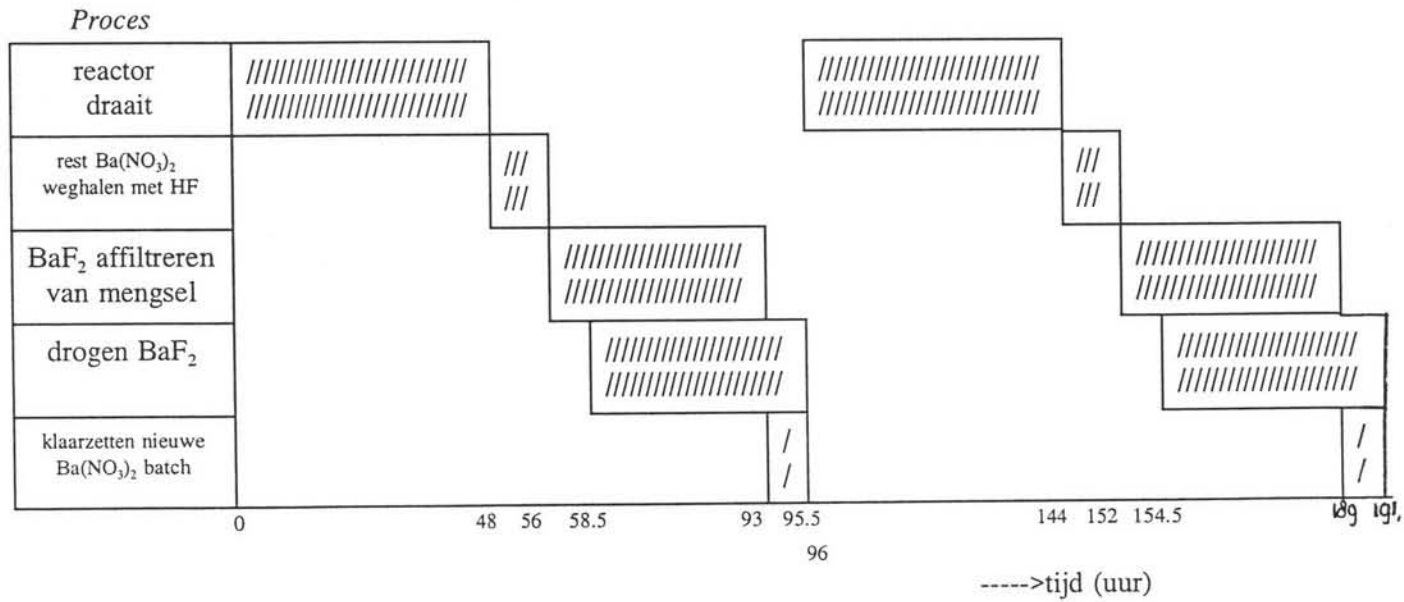
Dit filter, F85, werkt volgens een wisselmechanisme. Na 24 uur wordt het filter, F85A, gewisseld met filter F85B. Filter F85A wordt dan ontdaan van zijn bariumfluoride koek, welke nog steeds op  $70^\circ\text{C}$  is, en kan na de 24 uur die F85B in het proces in gebruik is weer worden ingezet terwijl F85B dan wordt ontdaan van de bariumfluoride koek. Ook hier is weer aangenomen dat het vloeistofvolume dat achterblijft bij het zout uit 10% van het zoutvolume bestaat.

Uit het filter komt een  $\text{HNO}_3$  oplossing die 37 uur per 48 uur afgevoerd wordt. De stroom met natte  $\text{BaF}_2$  (de bariumfluoride koek) wordt vervolgens ook in 37 uur door een droger, M86, geleid en gedroogd met hete lucht van  $150^\circ\text{C}$  en 1 bar. De aanvoer en afvoer van deze lucht neemt dezelfde tijd in beslag. De droge bariumfluoride die uit de droger komt bij  $75^\circ\text{C}$  en 1 bar kan worden verkocht. De natte lucht die de droger uitkomt met een temperatuur van  $100^\circ\text{C}$  en 1 bar wordt afgevoerd.

Als de reactor R67A leeg is kan in een periode van 2.5 uur het vat opnieuw worden gevuld met een bariumnitraat oplossing verzadigd met waterstofcyanide. Dit vat staat een half uur voor de in gebruikname klaar. Als nu dit half uur voorbij is wordt R67A weer in gebruik genomen en kan R67B worden opgewerkt.

Deze hele procedure staat voor de duidelijkheid nog eens vermeld in het cycliediagram in figuur 2.

**Figuur 2** Cyclediagram voor de batchgewijze opwerking van de  $Ba(NO_3)_2$ -vaten  
(Dit geldt voor één reactor)



Opmerking : Dit cyclediagram geldt voor één reactor, het systeem van twee reactoren werkt in het proces continu. Alleen de opwerking is dus batchgewijs.



## 4 Procesflowsheet- en apparatuurberekeningen

### 4.1 Enzymreactor

#### 4.1.1 Dimensionering van de enzymreactor

Door over de continu reactor een massabalans op te stellen voor respectievelijk R- en S-mandelonitril kan een waarde voor het in de reactor benodigde vloeistofvolume afgeleid worden.

Massabalans R-mandelonitril:

$$0 = -F_{RM,uit} + (v_1 - v_2 + 0.5 v_3 - v_4) * V_{aq} \quad (2)$$

Massabalans S-mandelonitril:

$$0 = -F_{SM,uit} + (0.5 v_3 - v_5) * V_{aq} \quad (3)$$

Hierin geldt:

$F_{RM,uit}$	: flow van R-mandelonitril uit de reactor	[mol/s]
$F_{SM,uit}$	: flow van S-mandelonitril uit de reactor	[mol/s]
$v_1$	: snelheid van de enzymatische synthese	[mol/l*s]
$v_2$	: snelheid van de enzymatische splitsing	[mol/l*s]
$v_3$	: reactiesnelheid van de chemische synthese van R/S-mandelonitril	[mol/l*s]
$v_4$	: reactiesnelheid van de chemische ontleding van R-mandelonitril	[mol/l*s]
$v_5$	: reactiesnelheid van de chemische ontleding van S-mandelonitril	[mol/l*s]
$V_{aq}$	: volume van de waterige fase	[l]

Vanwege de aanname dat zowel de chemische als de enzymatische reacties alleen in de waterige fase zullen optreden worden de reactiesnelheden vermenigvuldigd met het volume van de waterige fase. De totale flow (R+S) mandelonitril uit de reactor kan eenvoudig afgeleid worden uit de gewenste jaarproductie. Uiteraard dient hierbij gecorrigeerd te worden voor de verliezen als gevolg van de latere opzuivering van het produkt.

De uitgaande flows van R- en S-mandelonitril afzonderlijk kunnen bepaald worden uit de enantiomere excess (ee) waarvan de waarde op 0,98 is gesteld :

$$ee = \frac{[RM] - [SM]}{[RM] + [SM]} = \frac{F_{RM,uit} - F_{SM,uit}}{F_{RM,uit} + F_{SM,uit}} \quad (4)$$

Hierin geldt:

[RM] : concentratie R-mandelonitril in de waterige fase [mol/l]  
[SM] : concentratie S-mandelonitril in de waterige fase [mol/l]

De verschillende reactiesnelheden kunnen worden weergegeven op basis van de kinetiek zoals gegeven volgens het proefschrift van Udo Kragl<sup>(13)</sup>.

Voor de enzymatische synthese geldt de volgende vergelijking:

$$v1 = [E] * V_{\max}^{AB} * \frac{[A]}{K_m^A * (1 + [RM]/K_i^M) + [A]} * \frac{[B]}{K_m^B + [B]} \quad (5)$$

Voor de enzymatische splitsing geldt de onderstaande vergelijking:

$$v2 = [E] * V_{\max}^M * \frac{[RM]}{K_m^M * (1 + [A]/K_i^A) + [RM] * (1 + [B]/K_i^B)} \quad (6)$$

Voor de heen- en teruggaande chemische reacties geldt het volgende:

\* *reactiesnelheid van de chemische synthese van R/S-mandelonitril*

$$v_3 = k_2 * [A] * [B] \quad (7)$$

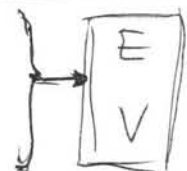
\* *reactiesnelheid van de chemische ontleding van R-mandelonitril*

$$v_4 = k_3 * [RM] \quad (8)$$

\* *reactiesnelheid van de chemische ontleding van S-mandelonitril*

$$v_5 = k_3 * [SM] \quad (9)$$

Design decisions<sup>23</sup> :  $e = 0.98$   
 $\xi = 0.75$



In vergelijkingen 5 t/m 9 betekenen de symbolen het volgende:

$V_{\max}^{AB}$	: maximale reactiesnelheid van de synthese	[mol/l*s]
[E]	: enzymconcentratie	[l enzymoplossing/l waterige fase]
[A]	: concentratie benzaldehyde in de waterige fase	[mol/l]
[B]	: concentratie waterstofcyanide in de waterige fase	[mol/l]
$K_m^A$	: Michaelis-menten-constante voor benzaldehyde	[mol/l]
$K_m^B$	: Michaelis-menten-constante voor waterstofcyanide	[mol/l]
$K_i^M$	: inhibitieconstante voor mandelonitril	[mol/l]
$V_{\max}^M$	: maximale reactiesnelheid van de splitsing	[mol/l*s]
$K_m^M$	: Michaelis-menten-constante voor mandelonitril	[mol/l]
$K_i^A$	: inhibitieconstante voor benzaldehyde	[mol/l]
$K_i^B$	: inhibitieconstante voor waterstofcyanide	[mol/l]
k2	: snelheidsconstante voor de chemische synthese	[l/mol*s]
k3	: snelheidsconstante voor de chemische splitsing	[s <sup>-1</sup> ]

Voor de waarden van bovenstaande parameters en concentraties wordt verwezen naar tabel 1, hoofdstuk 4.1.7. De concentraties van R- en S-mandelonitril afzonderlijk kunnen berekend worden uit de totaal concentratie van mandelonitril met behulp van vergelijking (4) voor de ee.

Voor de vaste verhouding waarin de verschillende componenten (waterstofcyanide, benzaldehyde, mtbe, water en citroenzuur) de reactor in dienen te gaan zijn waarden uit het artikel van Loos et.al.<sup>(15)</sup> als richtlijn genomen. Uitgaande van een bepaalde conversie (namelijk 75%) en de verdeling van de verschillende componenten over de waterige en de organische fase kunnen de concentraties van die componenten in de waterige fase bepaald worden. Met behulp van bovenstaande vergelijkingen kunnen vervolgens het volume van de waterige fase en de voor de conversie benodigde enzymconcentratie berekend worden.

De enzymconcentratie kan met de volgende omrekeningsfactor omgerekend worden naar g/l:

$$C_E = 1.9*[E] \quad (10)$$

Hierin geldt:  $C_E$  : enzymconcentratie [g/l]

Omdat er sprake is van een chemisch evenwicht kan slechts een beperkte conversie in de reactor gerealiseerd kan worden. Een conversie van 75 % is haalbaar gebleken, deze is dan ook als uitgangspunt genomen.

Op basis van een conversie van 75% werd voor het volume van de waterige fase 1.018 m<sup>3</sup> gevonden. Aangezien de waterige fase 40% van het totaal vloeistofvolume in de reactor inneemt volgt hieruit dat de organische en de waterige fase totaal 2.545 m<sup>3</sup> innemen. Het uiteindelijke reactorvolume ( $V_{\text{reactor}}$ ) is uit veiligheidsoverwegingen nog 30% groter genomen en bedraagt 3.636 m<sup>3</sup>.

De uiteindelijke dimensionering van de reactor inclusief de roerder is verricht volgens de richtlijnen van Van 't Riet en Tramper<sup>(10)</sup>.

Uitgangspunten hierbij zijn:

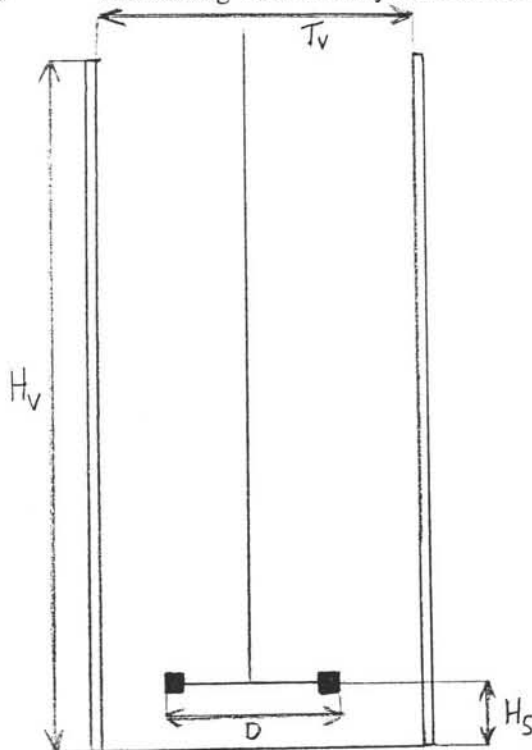
- \*  $H_v = 2 \cdot T_v$
- \*  $T_v/D = 3.33$
- \*  $H_s/D = 0.20$

Hierin geldt:  $H_v$  : hoogte reactor [m]  
 $T_v$  : diameter reactor [m]  
 $D$  : diameter roerder [m]  
 $H_s$  : hoogte roerder [m]

Als roerdertype is gekozen voor een zes bladige Rushton turbine roerder, mede omdat hier veel gegevens over beschikbaar zijn. De reactor zelf beschikt overigens over een koelmantel ("jacketted vessel").

In figuur 3 zijn de exacte dimensies van de enzymreactor en de roerder weergegeven.

Figuur 3 Afbeelding van de enzymreactor en de roerder



Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (2) t/m (10) betreft wordt verwezen naar tabel 1 in hoofdstuk 4.1.7.

Voor de exacte dimensies van de reactor wordt verwezen naar tabel 2 in hoofdstuk 4.1.7.

### 4.1.2 Het toerental van de roerder

Het ingestelde toerental van de roerder is bepalend voor de mate van menging, de energieconsumptie en de warmteoverdracht in de reactor. Met onderstaande vergelijking kan de mengtijd voor 90 tot 95% menging berekend worden :

$$t_m = \frac{\frac{3}{N} * \left(\frac{T_v}{D}\right)^3 * \left(\frac{H_v}{T_v}\right)}{N_p^{0.33}} \quad (11)$$

Voor het gebruik van deze vergelijking geldt de volgende voorwaarde:  $Re > 10^4$

In vergelijking (11) geldt:

$t_m$ :	mengtijd	[s]
$N$ :	toerental	[s <sup>-1</sup> ]
$N_p$ :	powernumber	[-]

Vergelijking (11) is alleen van toepassing in het turbulente regime (Reynoldsgetal groter dan  $10^4$ ). Indien  $Re < 10^4$  is dient de berekende mengtijd met een correctiefactor vermenigvuldigt te worden die afhankelijk is van het Reynoldsgetal. Richtwaarden voor deze correctiefactor zijn te vinden in van 't Riet en Tramper<sup>(10)</sup>. De mengtijd zal in de karakteristieke tijden analyse (hoofdstuk 4.1.5) nog nader ter sprake komen.

Het Reynoldsgetal wordt gegeven door de volgende vergelijking:

$$Re = \frac{N * D^2 * \rho}{\eta} \quad (12)$$

Hierin geldt:

$Re$ :	Reynoldsgetal	[-]
$\rho$ :	dichtheid medium	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\eta$ :	viscositeit medium	[Pa*s]

Het ingebrachte vermogen  $P_s$  van de roerder volgt uit:

$$P_s = N_p * \rho * N^3 * D^5 \quad (13)$$

Met:  $P_s$  : vermogen van de roerder [W]

Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (11) t/m (13) betreft wordt verwezen naar tabel 3 in hoofdstuk 4.1.7.

### 4.1.3 Warmteoverdracht in de reactor

Er is aangenomen dat de warmteproductie als gevolg van de omzettingen in de enzymreactor verwaarloosbaar is. In principe vindt alleen warmteproductie door de roerder en warmteoverdracht van de vloeistof naar de reactorwand plaats.

De warmteproductie  $r_{HS}$  door de roerder wordt gelijk gesteld aan het door de roerder ingebrachte vermogen:

$$r_{HS} = P_s \quad (14)$$

Met:  $r_{HS}$  : warmteproductie door de roerder [W]

Voor de warmteoverdracht  $r_{HW}$  van de vloeistof naar de reactorwand geldt:

$$r_{HW} = h_w * A_f * (T - T_l) \quad (15)$$

Met:  $r_{HW}$  : warmteoverdracht van vloeistof naar de wand [W]  
 $h_w$  : warmteoverdrachtscoëfficiënt [W/m<sup>2</sup>\*K]  
 $A_f$  : totaal wandoppervlak van de reactor [m<sup>2</sup>]  
 $T$  : mediumtemperatuur [°C]  
 $T_l$  : buitenlucht temperatuur [°C]

De netto in de reactor geproduceerde warmte  $H_c$  die dus door het koelwater afgevoerd moet worden bedraagt dan:

$$H_c = r_{HS} - r_{HW} \quad (16)$$

Uitgaande van een bepaald koeloppervlak van de koelmantel kan met vergelijkingen (17) t/m (20) het massadebiet,  $\phi_{mc}$ , en de uitgaande temperatuur,  $T_{CO}$ , van het koelwater berekend worden.

Voor het koeloppervlak geldt de volgende vergelijking:

$$A_c = \frac{H_c}{h_t} * \ln\left(\frac{T - T_{Cl}}{T - T_{CO}}\right) \quad (17)$$

Voor de inverse waarde van de totale warmteoverdrachtscoëfficiënt geldt:

$$\frac{1}{h_c} = \frac{1}{h} + \frac{d_w}{\lambda_w} \quad (18)$$

De vergelijking voor de warmteoverdrachtscoëfficiënt van het medium staat hieronder:

$$h = \frac{\lambda}{T_v} * 0.74 * \left( \frac{D^2 * N * \rho}{\eta} \right)^{0.67} * \left( \frac{C_p * \eta}{\lambda} \right)^{0.33} \quad (19)$$

Voor het massadebiet van het koelwater geldt:

$$\phi_{mc} = \frac{H_c}{C_{pc} * (T_{CO} - T_{Cl})} \quad (20)$$

De symbolen van vergelijkingen (17) t/m (20) staan hieronder verklaard:

$A_c$ :	koeloppervlak	[m <sup>2</sup> ]
$h_t$ :	totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> *K]
$h$ :	warmteoverdrachtscoëfficiënt van het medium	[W/m <sup>2</sup> *K]
$d_w$ :	dikte van de reactorwand	[m]
$\lambda_w$ :	warmte geleidbaarheid van de reactorwand	[W/m*K]
$\lambda$ :	warmte geleidbaarheid van het medium	[W/m*K]
$C_p$ :	specifieke warmte van het medium	[J/kg*°C]
$C_{pc}$ :	specifieke warmte van het koelwater	[J/kg*°C]
$T_{CO}$ :	temperatuur uitgaande koelwater	[°C]
$T_{Cl}$ :	temperatuur ingaande koelwater	[°C]
$H_c$ :	netto geproduceerde warmte	[W]
$\phi_{mc}$ :	massadebiet van het koelwater	[kg/s]

Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (14) t/m (20) betreft wordt verwezen naar tabel 4 in hoofdstuk 4.1.7.

#### 4.1.4 De pH in de enzymreactor

De enzymatische reactie in de waterige fase dient plaats te vinden bij een pH van 5. Een goede pH-regeling is essentieel aangezien een te lage pH de enzymatische omzetting zal onderdrukken en een te hoge pH de niet gekatalyzeerde chemische reactie kan bevorderen.

De vaste hoeveelheid citroenzuurbuffer die aan het systeem wordt toegevoegd heeft twee functies. In de eerste plaats is deze nodig voor de pH-regeling van de waterige fase. In de tweede plaats dient de citroenzuurbuffer om de oplosbaarheid van benzaldehyde in de waterige fase te vergroten. Voor dit laatste doel is een betrekkelijk grote overmaat van citroenzuur toegevoegd. Om de pH in de waterige fase daadwerkelijk op 5 te brengen dient een hoeveelheid natriumhydroxide (verder gedefinieerd als [OH<sup>-</sup>]) toegevoegd te worden.

De benodigde concentratie  $[OH^-]$  en de uiteindelijke pH in de waterige fase kunnen op basis van de onderstaande vergelijkingen berekend worden.

Voor HCN geldt de volgende vergelijking:

$$K_{a,HCN} = \frac{[CN^-] \cdot [H^+]}{[HCN]} \quad (21)$$

Met  $K_{a,HCN} = 6.166 \cdot 10^{-10}$  [mol/l]

Citroenzuur heeft drie waarden voor de  $K_a$ . De volgende vergelijkingen gelden:

$$K_{a1} = \frac{[HHC^-] \cdot [H^+]}{[HHHC]} \quad (22)$$

$$K_{a2} = \frac{[HC^{2-}] \cdot [H^+]}{[HHC^-]} \quad (23)$$

$$K_{a3} = \frac{[C^{3-}] \cdot [H^+]}{[HC^{2-}]} \quad (24)$$

Met:  $K_{a1} = 8.128 \cdot 10^{-4}$  [mol/l]  
 $K_{a2} = 1.778 \cdot 10^{-5}$  [mol/l]  
 $K_{a3} = 3.890 \cdot 10^{-6}$  [mol/l]

Benzoëzuur heeft één  $K_a$  waarde. Voor benzoëzuur geldt de onderstaande vergelijking:

$$K_{a,benz} = \frac{[B^-] \cdot [H^+]}{[BH]} \quad (25)$$

Met:  $K_{a,benz} = 6.457 \cdot 10^{-5}$

De waarden voor de  $K_a$ 's komen uit het Handbook<sup>(4)</sup>

Voor de totale concentraties van citroenzuur, HCN, benzoëzuur en  $H^+$  gelden de vergelijkingen (26) t/m (29):

$$[Citri]_{tot} = [HHHC] + [HHC^-] + [HC^{2-}] + [C^{3-}] \quad (26)$$

$$[HCN]_{tot} = [HCN] + [CN^-] \quad (27)$$

$$[Benzo]_{tot} = [BH] + [B^-] \quad (28)$$

$$[H^+]_{tot} = [H^+] - [OH^-] \quad (29)$$



De pH kan nu als volgt worden berekend:

$$pH = -\log[H^+]_{tot} \quad (30)$$

De symbolen van vergelijkingen (21) t/m (30) staan hieronder verklaard:

[HHHC]/ [HHC <sup>-</sup> ]/ [HC <sup>2-</sup> ]/ [C <sup>3-</sup> ]	concentraties gedeprotoneerd citroenzuur	[mol/l]
[HCN]/ [CN <sup>-</sup> ]	concentraties gedeprotoneerd waterstofcyanide	[mol/l]
[BH]/ [B <sup>-</sup> ]	concentraties gedeprotoneerd benzoëzuur	[mol/l]
[H <sup>+</sup> ]	proton concentratie op basis van enkel de zuurbijdrage	[mol/l]
[Citr] <sub>tot</sub>	totaal concentratie citroenzuur	[mol/l]
[Benzo] <sub>tot</sub>	totaal concentratie benzoëzuur	[mol/l]
[HCN] <sub>tot</sub>	totaal concentratie waterstofcyanide	[mol/l]
[OH <sup>-</sup> ]	hydroxide concentratie op basis van de opgeloste hoeveelheid natriumhydroxide	[mol/l]
[H <sup>+</sup> ] <sub>tot</sub>	netto proton concentratie	[mol/l]
pH	zuurtegraad	[-]

N.B. : alle concentraties zijn betrokken op de waterige fase.

Op basis van de gewenste pH in de waterige fase kan de benodigde [OH<sup>-</sup>] concentratie bepaald worden in de waterige fase. Uitgaande van de verdeling van natriumhydroxyde over de organische en de waterige fase kan vervolgens de benodigde aanvoerstream van natriumhydroxide bepaald worden.

Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (21) t/m (30) betreft wordt verwezen naar tabel 5 in hoofdstuk 4.1.7.

#### 4.1.5 Analyse van de karakteristieke tijden

Er is aangenomen dat de enzymatische omzetting de snelheidsbepalende stap binnen het systeem van de reactor vormt. Dit houdt in dat de stofoverdracht en de menging geen limiterende factor vormen. Een analyse van de karakteristieke tijden voor de stofoverdracht, de enzymatische omzetting en de menging toont aan dat deze aanname gegrond is.

Menging, stofoverdracht en de enzymatische omzetting zijn seriële processen, dit betekent dat het proces met de hoogste karakteristieke tijd de snelheidsbepalende stap binnen het systeem vormt. De berekende karakteristieke tijden voor de stofoverdracht en de enzymatische omzetting zijn betrokken op benzaldehyde.

De karakteristieke tijd  $\tau_{SO}$  voor de stofoverdracht tussen beide vloeistoffasen wordt gegeven door:

$$\tau_{SO} = \frac{1}{k_L A} \quad (31)$$

Hierin geldt:

$$\begin{aligned} k_L &: \text{stofoverdrachtscoëfficiënt aan de zijde van de continue (organische) fase [m/s]} \\ A &: \text{specifiek oppervlak van de gedispergeerde (waterige) fase [m^2/m^3]} \end{aligned}$$

De  $k_L A$  voor een mengsel van twee vloeistoffasen kan berekend worden uit onderstaande vergelijkingen.

Voor de stofoverdrachtscoëfficiënt aan de zijde van de continue (organische) fase geldt:

$$k_L = 0.13 * \left( \frac{\rho_c * D_m}{\eta_c} \right) * \left[ \left( \frac{P_s}{V_{aq}} \right) * \frac{\eta_c}{\rho_c^2} \right]^{0.25} \quad (32)$$

Het specifieke oppervlak van de gedispergeerde fase wordt als volgt weergegeven:

$$A = \frac{6}{d_d} * f_v \quad (33)$$

De druppelgrootte van de gedispergeerde fase wordt hieronder gedefinieerd:

$$d_d = 2.24 * \left[ \frac{\sigma^{0.6}}{\left( \frac{P_s}{V_{aq}} \right)^{0.4} * \rho_c^{0.2}} \right] * f_v^{0.5} * \left( \frac{\eta'}{\eta_c} \right)^{0.25} \quad (34)$$

De symbolen in de vergelijkingen (32) t/m (34) betekenen het volgende:

$\rho_c$	: dichtheid van de continue (organische) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]
$D_m$	: diffusiecoëfficiënt	[m <sup>2</sup> /s]
$\eta_c$	: viscositeit van de continue (organische) fase	[Pa*s]
$\eta'$	: viscositeit van de continue (waterige) fase	[Pa*s]
$d_d$	: druppelgrootte van de gedispergeerde (waterige) fase	[m]
$f_v$	: volume fractie van de gedispergeerde (waterige) fase	[-]
$\sigma$	: tussenfase spanning	[N/m]

De karakteristieke tijd  $\tau_c$  voor de enzymatische omzetting van benzaldehyde wordt gegeven door:

$$\tau_c = \frac{C_{benz}}{r_{benz}} \quad (35)$$

Met:  $C_{benz}$  : concentratie benzaldehyde in de waterige fase [mol/l]  
 $r_{benz}$  : omzettingssnelheid van benzaldehyde [mol/l\*s]

De karakteristieke tijd voor de menging  $t_m$  is reeds weergegeven in vergelijking (11) in hoofdstuk 4.1.2.

$\tau_c$  bedraagt 134.72 s,  $\tau_{SO}$  bedraagt 52.70 s en  $t_m$  bedraagt 40.89 s. Het is duidelijk dat de enzymatische omzetting de snelheidsbepalende stap in het systeem vormt.

Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (31) t/m (35) betreft wordt verwezen naar tabel 6 in hoofdstuk 4.1.7.

#### 4.1.6 Materiaalkeuze

In principe zullen de gebruikte stoffen mede door de verdunning van het oplosmiddel niet corrosief zijn. Eventueel vrijgekomen metaalionen van de reactorwand zouden echter wel de auto-oxidatie van benzaldehyde naar benzoëzuur kunnen katalyseren. Daarom zal de voorkeur voor het wandmateriaal uit gaan naar roestvast staal. Omdat de reactor betrekkelijk klein is zullen de kosten van het toegepaste materiaal in het algemeen aanvaardbaar zijn.

#### 4.1.7 Tabellen behorende bij de berekeningen van de enzymreactor

Tabel 1 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (2) t/m (10)

grootheid	waarde
$V_{m1}$	$1.018 \cdot 10^3$ L
$F_{SM,uit}$	$2.772 \cdot 10^{-4}$ mol/s
$F_{RM,uit}$	$2.745 \cdot 10^{-2}$ mol/s
ee	0.98
[RM]	$9.497 \cdot 10^{-3}$ mol/L
[SM]	$9.59 \cdot 10^{-5}$ mol/L
[A]	$3.598 \cdot 10^{-3}$ mol/L
[B]	0.626 mol/L
[E]	$4.597 \cdot 10^{-3}$
$C_c$	$8.735 \cdot 10^{-3}$ g/L
$V_{max}^{AB}$	$16.7 \cdot 10^{-3}$ mol/L*s
$V_{max}^M$	$2.39 \cdot 10^{-3}$ mol/L*s
$k_i^A$	$0.37 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_i^B$	$72.5 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_i^M$	$7.19 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_m^A$	$0.46 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_m^B$	$711 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_m^M$	$1.05 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$k_2$	$242 \cdot 10^{-6}$ L/mol*s
$k_3$	$856 \cdot 10^{-9}$ 1/s

= input

Tabel 2 : berekende dimensies van de reactor

grootheid	waarde
$V_{reactor}$	3.636 m <sup>3</sup>
$H_v$	3.8748 m
$T_v$	1.9374 m
D	0.5818 m
$H_g$	0.1164 m

Tabel 3 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (11) t/m (13)

grootheid	waarde
N	3 1/s
$N_p$	6
$\rho$	867.54 kg/m <sup>3</sup>
$\eta$	0.8299*10 <sup>-3</sup> Pa*s
$P_s$	9368.57 W
Re	1.06*10 <sup>6</sup>
$t_m$	40.89 s

Tabel 4 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (14) t/m (20)

grootheid	waarde
$r_{HS}$	9368.57 W
$r_{fW}$	589.60 W
$h_w$	10 W/m <sup>2</sup> *K
$A_f$	29.4799 m <sup>2</sup>
T	22 °C
$T_l$	20 °C
$H_C$	8778.97 W
$A_C$	16.56 m <sup>2</sup>
$h_t$	1449.33 W/m <sup>2</sup> *K
$T_{Cl}$	20 °C
$T_{CO}$	21.87 °C
$d_w$	0.02 m
h	2272.86 W/m <sup>2</sup> *K
$\lambda_w$	80 W/m*K
$\lambda$	0.2555 W/m*K
$C_p$	3074.27 J/kg*°C
$C_{pC}$	4200 J/kg*°C
$\phi_{mc}$	1.1178 kg/s

Tabel 5 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (21) t/m (30)

grootheid	waarde
$[\text{Cit}r]_{\text{tot}}$	$4.714 \cdot 10^{-2}$ mol/L
$[\text{HCN}]_{\text{tot}}$	0.626 mol/L
$[\text{Benzo}]_{\text{tot}}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$ mol/L
$[\text{H}^+]$	$5.8146 \cdot 10^{-3}$
$[\text{OH}^-]$	$5.8039 \cdot 10^{-3}$
$[\text{H}^+]_{\text{tot}}$	$1.073 \cdot 10^{-5}$
pH	4.97

Tabel 6 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (31) t/m (35)

grootheid	waarde
$\tau_{\text{SO}}$	52.70 s
$\tau_{\text{C}}$	134.72 s
$t_{\text{m}}$	40.89 s
$k_{\text{L}}$	$1.366 \cdot 10^{-5}$ m/s
A	1338.683 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>
$k_{\text{L}}A$	$1.898 \cdot 10^{-2}$ 1/s
$\rho_{\text{C}}$	738 kg/m <sup>3</sup>
$\eta_{\text{C}}$	$0.345 \cdot 10^{-3}$ Pa*s
$D_{\text{m}}$	$1 \cdot 10^{-9}$ m <sup>2</sup> /s
$d_{\text{J}}$	$1.728 \cdot 10^{-3}$ m
$f_{\text{v}}$	0.4
$\eta'$	$1 \cdot 10^{-3}$ Pa*s
$\sigma$	$36 \cdot 10^{-3}$ N/m
$C_{\text{benz}}$	$3.598 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$r_{\text{benz}}$	$2.670 \cdot 10^{-5}$ mol/L*s

De specificatielijst van de enzymreactor staat vermeld in bijlage 12.

## 4.2 De settler

### 4.2.1 Dimensionering van de settler

Er wordt gebruik gemaakt van een verticale settler. Het ontwerp is verricht volgens de richtlijnen van Coulson and Richardson<sup>(1)</sup>.

De settling snelheid  $u_d$  van de disperse (waterige) fase wordt gegeven door:

$$u_d = \frac{d_d^2 * g * (\rho_d - \rho_c)}{18\mu_c} \quad (36)$$

Met:	$u_d$ :	settling snelheid van de gedispergeerde fase	[m/s]
	$d_d$ :	druppel diameter	[m]
	$\mu_c$ :	viscositeit van de continue fase	[N*s/m <sup>2</sup> ]
	$g$ :	gravitatie versnelling, 9.81	[m/s <sup>2</sup> ]
	$\rho_d$ :	dichtheid disperse (waterige) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]
	$\rho_c$ :	dichtheid continue (organische) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]

De druppel diameter  $d_d$  volgt uit vergelijking (34).

Voor dit systeem werd een  $u_d$  gevonden van  $8.755 \cdot 10^{-3}$  m/s gevonden. Indien de settling snelheid  $u_d > 4 \cdot 10^{-3}$  m/s is, dient een waarde van  $4 \cdot 10^{-3}$  m/s voor de settling snelheid als uitgangspunt genomen te worden.

Voor de instroom snelheid  $u_c$  van de continue fase geldt:

$$u_c = \frac{L_c}{A_i} < u_d < 4 \cdot 10^{-3} \text{ m/s} \quad (37)$$

Hierin geldt:	$u_c$ :	instroom snelheid continue fase	[m/s]
	$L_c$ :	volume debiet continue fase	[m <sup>3</sup> /s]
	$A_i$ :	interface oppervlak	[m <sup>2</sup> ] (zie fig. 4)

Indien gekozen wordt voor een  $u_c$  van  $0.5 \cdot 10^{-3}$  m/s wordt een  $A_i$  gevonden van  $0.0719 \text{ m}^2$ .

De diameter  $D_s$  van de cilindrische verticale settler volgt uit:

$$A_i = 0.25\pi D_s^2 \quad (38)$$

Met:  $D_s$  : diameter settler [m]

De hoogte  $H_s$  van de settler volgt uit:

$$H_s = 2D_s \quad (39)$$

Voor het volume  $V_s$  van de settler geldt de volgende vergelijking:

$$V_s = A_f * H_s \quad (40)$$

Hierin is:  $V_s$  : settler volume [m<sup>3</sup>]

De dikte van de dispersieband  $B$  wordt gegeven door:

$$B = 0.10H_s \quad (41)$$

Met:  $B$  : dispersieband [m]

Voor de verblijftijd  $\tau_d$  van de druppels in de dispersieband geldt:

$$\tau_d = \frac{B}{u_d} \quad (42)$$

Met:  $\tau_d$  : verblijftijd van de druppels in de dispersieband [s]

Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (36) t/m (42) betreft wordt verwezen naar tabel 7 in hoofdstuk 4.2.5.



#### 4.2.2 Configuratie van de aan- en afvoerpijpen

De instroomsnelheid van de vloeistof moet, om stremming te voorkomen, kleiner dan 1 m/s zijn. Er is gekozen voor een instroomsnelheid van 0.1 m/s zodat, uitgaande van een volumedebiet van 0.2172 m<sup>3</sup>/h, het aanvoerpijp oppervlak ( $A_p$ ) en de aanvoerpijp diameter ( $D_p$ ) respectievelijk 6.033 m<sup>2</sup> en 2.77 cm zijn.

De hoogtes van de interface ( $z_3$ ), de organische fase afvoer ( $z_1$ ) en de waterige fase afvoer ( $z_2$ ) worden berekend volgens de volgende vergelijkingen (zie fig. 4):

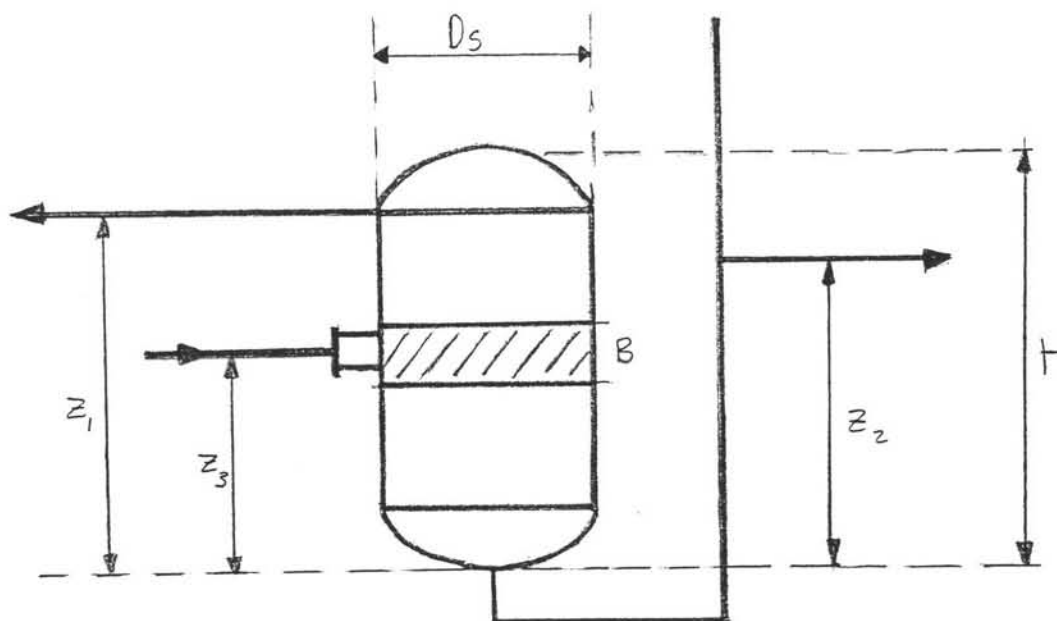
$$z_1 = 0.9 \cdot H_s \quad (43)$$

$$z_3 = 0.5 \cdot H_s \quad (44)$$

$$z_2 = \frac{(z_1 - z_3) \cdot \rho_c}{\rho_d} + z_3 \quad (45)$$

Hierin geldt:  $z_3$ : interface hoogte [m]  
 $z_2$ : waterige fase afvoer hoogte [m]  
 $z_1$ : organische fase afvoer hoogte [m]

Figuur 4 afbeelding van de settler



Wat de getalsmatige invulling en de berekende waarden van vergelijking (43) t/m (45) betreft wordt verwezen naar tabel 8 in paragraaf 4.2.5.

### 4.2.3 De pH van de waterige fase in de settler

Voordat de afvoerstream uit de enzymreactor in de settler wordt geleid wordt eerst zwavelzuur toegevoegd om de pH van de waterige fase op 3 te brengen. Op deze wijze kan de voortzetting van de niet gekatalyseerde chemische reactie onderdrukt worden.

De pH in de waterige fase kan wederom berekend worden uitgaande van vergelijkingen (22) t/m (30). Echter,  $[H^+]_{tot}$  moet nu wel gecorrigeerd worden voor de extra aanwezige  $H^+$  in de waterige fase als gevolg van de zwavelzuur toevoeging zodat geldt:

$$[H^+]_{tot} = [H^+] - [OH^-] + [H^+]_{H_2SO_4} \quad (46)$$

Hierin is:

$[H^+]_{H_2SO_4}$  = proton concentratie in de waterige fase afkomstig van toegevoegd zwavelzuur [mol/l]

Op basis van de gewenste pH (pH = 3) in de waterige fase kon, rekening houdend met de verdeling van zwavelzuur over de organische en de waterige fase bepaald worden hoeveel zwavelzuur per uur toegevoegd moest worden.

Voor de getalsmatige invulling en de berekende waarden behorende bij deze pH berekening wordt verwezen naar tabel 9 in hoofdstuk 4.2.5.

### 4.2.4 Materiaal keuze

Vanwege de verdunning van (het corrosieve) benzaldehyde door het oplosmiddel, de beperkte verblijftijd en de zeer onturbulente toestand in de settler zal auto-oxidatie naar benzoëzuur niet voorkomen. Echter, vanwege de lage pH (=3), is gekozen voor roestvast staal als constructiemateriaal.

## 4.2.5 Tabellen behorende bij de berekeningen van de settler

Tabel 7 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (36) t/m (42)

grootheid	waarde
$u_d$	$8.755 \cdot 10^{-3}$ m/s
$d_d$	$1.728 \cdot 10^{-3}$ m
$g$	9.81 m/s <sup>2</sup>
$\rho_d$	987.869 kg/m <sup>3</sup>
$\rho_c$	771.137 kg/m <sup>3</sup>
$\mu_c$	$0.545 \cdot 10^{-3}$ N*s/m <sup>2</sup>
$L_c$	$3.593 \cdot 10^{-5}$ m <sup>3</sup> /s
$A_i$	0.0719 m <sup>2</sup>
$D_s$	0.3025 m
$H_s$	0.605 m
B	0.0605 m
$\tau$	15,13 s
$V_s$	0.0435 m <sup>3</sup>

Tabel 8 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (43) t/m (45)

grootheid	waarde
$A_p$	6.033 m <sup>2</sup>
$D_p$	2.77 cm
$z_1$	0.5445 m
$z_2$	0.4914 m
$z_3$	0.3025 m

Tabel 9 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij par. 4.2.3

grootheid	waarde
$[\text{Citr}]_{\text{tot}}$	$4.714 \cdot 10^{-2}$ mol/L
$[\text{HCN}]_{\text{tot}}$	0.625 mol/L
$[\text{Benzo}]_{\text{tot}}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$ mol/L
$[\text{H}^+]$	$5.8150 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$[\text{OH}^-]$	$5.805 \cdot 10^{-3}$ mol/L
$[\text{H}^+]_{\text{H}_2\text{SO}_4}$	$9.54 \cdot 10^{-4}$ mol/L
$[\text{H}^+]_{\text{tot}}$	$9.640 \cdot 10^{-4}$ mol/L
pH	3.02

De specificatielijst van de settler staat in bijlage 16.

### 4.3 Ontwerp van de ontwateringsreactor

Het ontwerp van de ontwateringsreactor is geheel analoog uitgevoerd aan die van de enzymreactor (dus volgens de richtlijnen van Van 't Riet en Tamper<sup>(10)</sup>, die vermeld staan in hoofdstuk 4.1.1). Er is gekozen voor een verblijftijd van 5 uur.

In onderstaande tabellen staat een opsomming van de gebruikte parameters en de berekende waarden.

Tabel 10 : berekende dimensies van de ontwateringsreactor

grootheid	waarde
$V_{\text{reactor}}$	0.1430 m <sup>3</sup>
$H_v$	1.3177 m
$T_v$	0.6589 m
$D$	0.3957 m
$H_s$	0.0791 m

Tabel 11 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (11) t/m (13)

grootheid	waarde
$N$	3 1/s
$N_p^{*1}$	5.5
$\rho$	1354.50 kg/m <sup>3</sup>
$\eta$	$0.1 \cdot 10^{-3}$ Pa*s
$P_s$	1951.35 W
$Re$	6362.55
$t_m^{*2}$	82 s

\*1 Omdat  $Re < 10^4$  moet de  $N_p$  aangepast worden. Op basis van richtlijnen uit Van 't Riet en Tamper<sup>(10)</sup> heeft (uitgaande van  $Re=6362.55$ )  $N_p$  een waarde van 5.5.

\*2 De berekende mengtijd is vermenigvuldigt met een factor 2 als correctie voor het lagere Reynoldsgetal.

Tabel 12 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (14) t/m (20)

grootheid	waarde
$r_{HS}$	1951.35 W
$r_{HW}$	68.19 W
$h_w$	10 W/m <sup>2</sup> *K
$A_f$	3.4093 m <sup>2</sup>
$T$	22 °C
$T_i$	20 °C
$H_C$	1883.16 W
$A_C$	1.86 m <sup>2</sup>
$h_t$	610.31 W/m <sup>2</sup> *K
$T_{Ci}$	20 °C
$T_{Co}$	21.905 °C
$d_w$	0.01 m
$h$	660.72 W/m <sup>2</sup> *K
$\lambda_w$	80 W/m*K
$\lambda$	0.1453 W/m*K
$C_p$	2348.36 J/kg*°C
$C_{pC}$	4200 J/kg*°C
$\phi_{mc}$	0.495 kg/s

De specificatielijst van de ontwateringsreactor staat vermeld in bijlage 12.

## 4.4 De Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor

### 4.4.1 Achtergrondaspecten

Onderin de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor wordt op een temperatuur van 70 °C een gasvormige stroom bestaande uit MTBE, HF, HCN en een kleine hoeveelheid water geleid. De bariumnitraat oplossing in de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor moet gedurende 48 uur gasvormig waterstoffluoride opnemen en doen neerslaan in de vorm van BaF<sub>2</sub> dat zeer slecht (danwel niet) oplosbaar is in water.

In de reactor bevindt zich een dusdanige overmaat bariumnitraat dat na 48 uur slechts 90 % van de oorspronkelijk ingebrachte hoeveelheid bariumnitraat gebonden zal zijn. Op deze manier kan vermeden worden dat gasvormig waterstoffluoride aan de reactor ontsnapt en de recyclestromen vervuult.

Gedurende 48 uur moet totaal 144 kg HF gebonden worden. Hiertoe wordt gebruik gemaakt van een oplossing bestaande uit 1045.6 kg Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> en 5176.24 kg water (deze hoeveelheden zijn berekend met behulp van de maximale oplosbaarheid van bariumnitraat in water, namelijk 202 g/l).

Er wordt aangenomen dat het apolaire gasvormige MTBE niet zal oplossen in het water. Tevens wordt aangenomen dat het meegevoerde spoortje water in de gasstroom bij 70°C volledig in de oplossing zal achterblijven.

Om te voorkomen dat ook het doorgevoerde gasvormige HCN zal oplossen dient de oplossing in de reactor verzadigd te worden met HCN.

Met onderstaande vergelijking kan de benodigde molfractie HCN,  $x_{\text{HCN}}$ , in de oplossing, uitgaande van de verdeling van HCN tussen gas en vloeistof in de evenwichtssituatie, berekend worden:

$$K = \frac{P_{\text{HCN}}}{x_{\text{HCN}}} \quad (47)$$

Hierin geldt: K : Henryconstante [bar]  
 $P_{\text{HCN}}$  : partiaaldruk van HCN in de gasfase [bar]  
 $x_{\text{HCN}}$  : molfractie HCN in de oplossing [-]

Op basis van de berekende molfractie en het volume van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor kan afgeleid worden dat het toevoegen van totaal 7.7 kg HCN aan de oplossing afdoende is om het oplossen van gasvormige HCN tegen te gaan.

Ook wordt er aangenomen dat HF, eenmaal opgelost in het water, dusdanig snel bindt aan het opgeloste bariumnitraat dat de oplossing niet verzadigd kan raken met waterstoffluoride. Uitgerekend kan worden dat indien 90% van de bariumnitraat weggereageerd is de pH 0.11 bedraagt.

#### 4.4.2 Dimensionering van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor

Het ontwerp van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor is geheel analoog uitgevoerd aan die van de enzymreactor (dus volgens de richtlijnen van Van 't Riet en Tamper<sup>(10)</sup>, die vermeld staan in hoofdstuk 4.1.1).

Echter, het door de roerder ingebrachte vermogen voor een systeem waarbij gas wordt ingeblazen zal anders zijn en volgt uit:

$$\frac{P_{sg}}{P_{so}} = 0.10 * \left( \frac{F_g}{N * V_l} \right)^{-0.25} * \left( \frac{N^2 * D^4}{g * H_s * V_l^{2/3}} \right)^{-0.20} \quad (48)$$

De symbolen in deze vergelijking hebben de volgende betekenis:

$P_{sg}$ :	roerder vermogen onder gasbeluchting	[W]
$P_{so}$ :	onbegast roerder vermogen	[W] (zie vgl. 12)
$F_g$ :	gas volumedebiet	[m <sup>3</sup> /s]
$V_l$ :	vloeistofvolume	[m <sup>3</sup> ]

Uitgaande van het benodigde vloeistofvolume is gekozen voor een reactorvolume van 6 m<sup>3</sup>. Als constructiemateriaal is roestvast staal gekozen vanwege de lage pH.

In onderstaande tabellen staat een opsomming van de gebruikte parameters en de berekende waarden. In bijlage 12 staat de specificatielijst van deze reactor.

Tabel 13: parameterwaarden en berekende waarde behorende bij vgl. (47)

grootheid	waarde
K (70°C)	7.06*10 <sup>3</sup> bar
$P_{HCN}$	0.361 bar
$x_{HCN}$	5.11*10 <sup>-5</sup>

Tabel 14 : berekende dimensies van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor

grootheid	waarde
$V_{reactor}$	6 m <sup>3</sup>
$H_v$	4.5789 m
$T_v$	2.2894 m
D	0.6875 m
$H_s$	0.1375 m



Tabel 15 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (11) t/m (13)

grootheid	waarde
N	2 l/s
$N_p$	6
$\rho$	1448.00 kg/m <sup>3</sup>
$\eta$	1*10 <sup>-3</sup> Pa*s
$P_{s0}$	10675.14 W
$P_{sg}$	3851.30 W
$V_l$	5.2 m <sup>3</sup>
$F_g$	0.2056 m <sup>3</sup> /s
Re	1.37*10 <sup>6</sup>
$t_m$	122.66 s

Tabel 16 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (14) t/m (20)

grootheid	waarde
$r_{HS}$	3851.30 W
$r_{HW}$	16466.6 W
$h_w$	10 W/m <sup>2</sup> *K
$A_f$	41.1665 m <sup>2</sup>
T	60 °C
$T_l$	20 °C
$H_C$	-12615.3 W
$A_C$	28.77 m <sup>2</sup>
$h_i$	1406.69 W/m <sup>2</sup> *K
$T_{Cl}$	80 °C
$T_{Co}$	70.404 °C
$d_w$	0.04 m
h	4741.85 W/m <sup>2</sup> *K
$\lambda_w$	80 W/m*K
$\lambda$	0.596 W/m*K
$C_p$	4200 J/kg*°C
$C_{pC}$	4200 J/kg*°C
$\phi_{mc}$	0.313 kg/s

## 4.5 Ontwerp van de slurymenger

Het ontwerp van de slurymenger is geheel analoog uitgevoerd aan die van de enzymreactor (dus volgens de richtlijnen van Van 't Riet en Tramper<sup>(10)</sup>, die vermeld staan in hoofdstuk 4.1.1).

In onderstaande tabellen staat een opsomming van de gebruikte parameters en de berekende waarden.

Tabel 17 : berekende dimensies van de ontwateringsreactor

grootheid	waarde
$V_{\text{reactor}}$	0.1 m <sup>3</sup>
$H_v$	1.1696 m
$T_v$	0.5848 m
D	0.3512 m
$H_s$	0.0702 m

Tabel 18 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (11) t/m (13)

grootheid	waarde
N	2 1/s
$N_p^{*1}$	5
$\rho$	2245.287 kg/m <sup>3</sup>
$\eta$	$0.5 \cdot 10^{-3}$ Pa*s
$P_s$	479.85 W
Re	1107.75
$t_m^{*2}$	130.26 s

\*1 Omdat  $Re < 10^4$  moet de  $N_p$  aangepast worden. Op basis van richtlijnen uit van 't Riet en Tramper<sup>(10)</sup> is (uitgaande van  $Re=1107.75$ ) voor een waarde van 5.

\*2 De berekende mengtijd is vermenigvuldigt met een factor 2 als correctie voor het lagere Re-getal.

Tabel 19 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (14) t/m (20)

grootheid	waarde
$r_{HS}$	479.85 W
$r_{HW}$	53.72 W
$h_w$	10 W/m <sup>2</sup> *K
$A_f$	2.686 m <sup>2</sup>
$T$	22 °C
$T_1$	20 °C
$H_C$	426.13 W
$A_C$	1.84 m <sup>2</sup>
$h_t$	394.11 W/m <sup>2</sup> *K
$T_{Ci}$	20 °C
$T_{CO}$	21.635 °C
$d_w$	0.01 m
$h$	414.536 W/m <sup>2</sup> *K
$\lambda_w$	80 W/m*K
$\lambda$	0.1434 W/m*K
$C_p$	2848.33 J/kg*°C
$C_{pC}$	4200 J/kg*°C
$\phi_{mc}$	0.062 kg/s

In bijlage 12 staat de specificatielijst van deze reactor.

#### 4.6 Ontwerp van het citroenzuur mengvat, het NaOH mengvat en het $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ opslagvat

Het ontwerp van de mengvaten is geheel analoog uitgevoerd aan die van de enzymreactor (dus volgens de richtlijnen van Van 't Riet en Tamper<sup>(10)</sup>, die vermeld staan in hoofdstuk 4.1.1). De mengvaten zijn niet voorzien van een koelmantel. Alle vatten zijn van carbon steel.

In onderstaande tabellen staat een opsomming van de gebruikte parameters en de berekende waarden. In bijlage 13 staat een specificatielijst voor deze mengers.

Tabel 20 : berekende dimensies van de mengvaten

grootheid	waarde (citraenzuur mengvat)	waarde (NaOH mengvat)	waarde ( $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ opslagvat)
$V_{\text{reactor}}$	$2.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$	$2.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$	8 m <sup>3</sup>
$H_v$	0.3420 m	0.3420 m	5.0397 m
$T_v$	0.1710 m	0.1710 m	2.5198 m
D	0.0514 m	0.0514 m	0.7567 m
$H_s$	0.0103 m	0.0103 m	0.1513 m

Tabel 21 : parameterwaarden en berekende waarden behorende bij vgl. (10) t/m (12)

grootheid	waarde (citraenzuur mengvat)	waarde (NaOH mengvat)	waarde ( $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ opslagvat)
N	4 1/s	4 1/s	0.1 1/s
$N_p$	6	6	6
$\rho$	1183.401 kg/m <sup>3</sup>	1000 kg/m <sup>3</sup>	1373.111 kg/m <sup>3</sup>
$P_s$	0.1630 W	0.1378 W	2.0440 W
$\tau$	1 h	100 h	n.v.t.

N.B.: Voor alle vaten geldt  $Re > 10^4$

## 4.7 Ontwerp van de zoutfilters

### 4.7.1 Inleiding

Er wordt in het proces gebruik gemaakt van zogenaamde *Nutsche gravitatie filters*, en wel van het *Rosenmund* type. Deze filters zijn voorzien van verdelers (deze zorgen voor een gelijkmatige spreiding van het filtraat over het filteroppervlak) en van schrapers. Het ontwerp is beperkt tot het geven van het benodigde filteroppervlak en het filtermateriaal.

Bij de keuze van het zoutfiltermateriaal is aangenomen dat de op te vangen zoutdeeltjes groter zijn dan  $10\mu\text{m}$ . Het gekozen materiaal beschikt over een uitstekende weerstand tegen aggresieve stoffen en de structuur is zodanig dat deze een zeer goede doorstroming toelaat.

Ieder filter wordt na 24 uur verwisselt en van de zoutkoek ontdaan. Van alle drie de filters staat een specificatielijst in bijlage 15.

### 4.7.2 Enzymfilter

De enzym massastroom die moet worden opgevangen bedraagt  $7.2468 \cdot 10^{-3}$  kg/uur. Gedurende de 24 uur dat het filter in werking is zal de geringe ophoping van het enzym geen invloed hebben op de grootte van het volumedebiet dat door het filter heen gaat.

Gekozen is voor een *cellulose membraanfilter* met een oppervlak van  $1\text{ m}^2$ .

### 4.7.3 $\text{Na}_2\text{SO}_4$ filter

Het natte-zout debiet bedraagt  $6.9616 \cdot 10^{-3}$   $\text{m}^3/\text{h}$ . Indien uitgegaan wordt van een filteroppervlak van  $5\text{ m}^2$ , geeft dit na 24 uur een natte zoutlaag van 3.342 cm. Aangenomen wordt dat een dergelijke zoutdikte geen relevante weerstand voor de doorstroming met zich meebrengt.

Gekozen is voor de volgende specificaties:

*materiaal	: polypropyleen
*"weave"	: satin
*"yam"	: monofilament

#### 4.7.4 BaF<sub>2</sub>-filter

Het natte-zout debiet bedraagt  $4.3035 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$ . Indien uitgegaan wordt van een filteroppervlak van  $5 \text{ m}^2$ , dan geeft dit na 24 uur een natte zoutlaag van 2.066 cm. Aangenomen wordt dat een dergelijke zoutdikte geen relevante weerstand voor de doorstroming met zich meebrengt. Gekozen is voor de volgende specificaties:

*materiaal	: polypropyleen
*"weave"	: satin
*"yarn"	: monofilament

#### 4.8 Ontwerp van het zoutopvangvat en de transportschroef

Het zout afkomstig van het Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> filter wordt opgeslagen in een carbon steel zoutopvangvat van  $0.1 \text{ m}^3$  (H=1.1696 m, T<sub>v</sub>=0.5848 m). Het natte zout moet met behulp van een transportschroef naar de droger vervoerd worden. Transportschroeven zijn in standaard configuraties verkrijgbaar.

Het benodigde natte zout debiet bedraagt  $6.9616 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{h}$ . Uitgaande van de richtlijnen volgens Perry's<sup>(21)</sup> moet dan gekozen worden voor een transportschroef met een schroefdiameter van 15 cm waarbij het bezette schroefbladoppervlak door het zout 30% bedraagt. Het in te stellen toerental bedraagt dan 0.101 rpm. Dit is bepaald op basis van de constant veronderstelde verhouding tussen doorzet en toerental van een standaard transportschroef. Voor de lengte is 2 m gekozen. Het vat is in het ontwerp voorzien van een automatische schudder om een evenredige hoogteverdeling in het vat in stand te houden. (De specificatie van dit apparaat staat in bijlage 14)

#### 4.9 Ontwerp van de verdamper

De verdamper wordt gebruikt om het grootste deel van de waterige vloeistof te verdampen en de achtergebleven zouten met een klein deel van het water als slurry af te voeren. De hoeveelheid warmte die in deze stroom ingebracht wordt bedraagt 60.12 KW (deze waarde komt uit Chemcad). Als verwarmingsmedium wordt stoom (bij 1.7 bar) gebruikt. (Een specificatieblad staat in bijlage 10)

Het warmtetransport kan berekend worden met:

$$\Phi_w = U \cdot A \cdot \Delta T_m \quad (49)$$

met:	$\Phi_w$	: 60.12, warmte capaciteit	[kW]
	U	: 1000, overall warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> /°C]
	A	: buiten oppervlakte van de tubes	[m <sup>2</sup> ]
	$\Delta T_m$	: het gemiddelde temperatuurverschil	[°C]

Het gemiddelde temperatuurverschil  $\Delta T_m$  :

$$\Delta T_m = T_1 - T_2 = 115.2 - 101 = 14.2^\circ \text{C} \quad (50)$$

Hierin is:  $T_1$  : verzadigde temperatuur van stoom bij 1.7 bar  $[\text{°C}]$   
 $T_2$  : temperatuur van proces stroom  $[\text{°C}]$

Vergelijking (49) kan nu zodanig worden herschreven dat het oppervlak (A) kan worden bepaald. Het oppervlak wordt:

$$A = 60.12 \cdot 10^3 / (1000 \cdot 14.2) = 4.23 \text{ m}^2$$

Er worden "plain U-tubes" gebruikt met een binnendiameter van 25 mm en een buitendiameter van 30 mm. De lengte is 4.8 m.

Het aantal "tubes" ( $N_t$ ) wordt berekend volgens:

$$N_t = A / (\pi \cdot d_0 \cdot L) = 4.23 / (30 \cdot 10^{-3} \cdot \pi \cdot 4.8) = 10 \quad (51)$$

met:  $d_0$  : de buiten diameter van een "tube" [m]  
 $L$  : de lengte van een "tube" [m]

De bundeldiameter ( $D_b$ ) kan berekend worden met:

$$D_b = d_0 \cdot \left( \frac{N_t}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} \quad (52)$$

Hierin betekenen de symbolen het volgende:

$d_0$  : buiten diameter van de tubes [m]  
 $N_t$  : het aantal "tubes", ( $2 \cdot 10 = 20$  voor de "U-tubes") [-]  
 $K_1, n_1$  : twee constanten die afhankelijk zijn van de "pitch", het aantal passages en de afstand tussen de "tubes",  $K_1 = 0.215$ ,  $n_1 = 2.207$  voor een "square pitch"

Vergelijking (52) kan nu worden ingevuld. Dit levert:

$$D_b = 30 \cdot 10^{-3} \cdot (20 / 0.215)^{1/2.207} = 0.24 \text{ m}$$

Voor de diameter van de shell ( $D_s$ ) geldt het onderstaande:

$$D_s = 2 \cdot D_b = 0.48 \text{ m} \quad (53)$$

De hoeveelheid stoom (m) die nodig is kan als volgt worden bepaald:

$$m = \Phi_w / \Delta H = (60.12 / 2699.4) \cdot 3600 = 80.1778 \text{ kg/h} \quad (54)$$

met hierin:  $\Delta H = 2699.4$ , het verdampingswarmte van stoom [kJ/kg]

#### 4.10 Ontwerp van de destillatie torens

De hoogte van de schotelsectie ( $H_{\text{schotelsectie}}$ ) kan berekend worden met:

$$H_{\text{schotelsectie}} = \frac{0.6096 * N}{E_0} \quad (55)$$

Hierin geldt:

N	: het aantal schotels	[-]
$E_0$	: het overall schotelrendement, in dit geval 90%	[-]
0.6096	: de schotelafstand van de destillatietoren, bepaald door Chemcad	[m]

De hoogte van de kolom ( $H_{\text{kolom}}$ ) kan als volgt berekend worden:

$$H_{\text{kolom}} = 1.15 * H_{\text{schotelsectie}} \quad (56)$$

Hierbij is er aangenomen dat de hoogte van de top en de bodemsectie samen, in de kolom, 15% bedraagt van de totale hoogte van de schotelsectie.

Het oppervlakte van de kolom ( $A_t$ ) kan berekend worden met onderstaande vergelijking:

$$A_t = \frac{\phi_v}{\frac{F * 3600 * 0.88}{\sqrt{\rho_g}}} \quad (57)$$

met:	$\phi_v$	: flow door de kolom	[m <sup>3</sup> /s]
	F	: constante, een waarde van 1.5 in deze formule	[-]
	$\rho_g$	: dichtheid van het gas	[kg/m <sup>3</sup> ]
	0.88	: er is aangenomen dat 12% van de dwarsdoorsnede opgenomen wordt door de downcomers	[-]
	3600	: het getal voor de omrekening van m/s naar m/h	[-]

De waarden voor de oppervlakken zijn overgenomen van Chemcad.

De diameter van de kolom ( $D_t$ ) kan berekend worden met:

$$D_t = \sqrt{\frac{4 * A_t}{\pi}} \quad (58)$$



De berekende waarden voor de schotelkolommen staan vermeld in tabel 22.

Tabel 22: dimensies van de schotelkolommen

destillatiekolom	N	$H_{\text{schotelsecte}}$ (m)	$H_{\text{kolom}}$ (m)	$A_t$ (m <sup>2</sup> )	$D_t$ (m)
T1	18	12.192	14.021	0.018	0.152
T2	22	14.901	17.137	0.073	0.305
T3	25	16.933	19.473	0.073	0.305

Uit de waarden in de tabel 22 volgt dat alle schotelkolommen een grote H/D verhouding hebben ten opzichte van de waarde die in de praktijk haalbaar is (20). Hierdoor worden voor deze destillatietorens gepakte bed kolommen gekozen in plaats van schotelkolommen.

Volgens Coulson en Richardson<sup>(1)</sup> kunnen de gepakte bed afmetingen bepaald worden met de gegevens die voor een zeefplaatkolom zijn berekend. Hiervoor worden een paar omrekeningswaarden gegeven in tabel 23.

Tabel 23: Omrekeningswaarden voor de gepakte kolom

	Size (mm)	HETP (m)
1	25	0.4-0.5
2	38	0.6-0.75
3	50	0.75-1.0

De "Size" is de hoogte van het gepakte bed dat overeen komt met de "HETP" van een zeefplaatkolom. Deze HETP is de afstand tussen twee platen in de kolom. Hier gelden de getallen van de tweede omrekeningswaarden uit tabel 23, omdat we een zeefplaatafstand hebben gekozen van twee "feet" = 0.6096 m.

De berekende waarden voor de gepakte bed kolommen staan in tabel 24.

Tabel 24: dimensies van de gepakte bed kolommen

destillatietoren	$H_{\text{gepakte bed}}$ (m)	$H_{\text{kolom}}$ (m)	$A_t$ (m <sup>2</sup> )	$D_t$ (m)
T1	0.684	0.787	0.071	0.300
T2	0.836	0.961	0.080	0.320
T3	0.950	1.093	0.104	0.364

In bijlage 8<sup>A-C</sup> staan de specificatieformulieren van de torens vermeld.

## 4.11 Ontwerp van de zeoliet-kolom

De zeoliet-kolom wordt gebruikt om het overgebleven water uit een deel van de produktstroom na het filter te verwijderen. Deze kolom is 48 uur operatief, daarna wordt deze vervangen door een tweede zeoliet kolom die op dezelfde wijze opereert. De eerste kolom wordt in de tussentijd geregenereerd. Dit proces wordt continu uitgevoerd. De kolommen zijn gepakte bed kolommen, met als vullingsmateriaal zeoliet 4A.

Alle benodigde gegevens zijn afkomstig uit Breck<sup>(24)</sup>.

De berekening is als volgt:

De hoeveelheid water ( $M_w$ ) die moet worden weggehaald wordt hieronder berekend:

$$M_w = \Phi_m * t = 0.0086 * 48 = 0.4128 \text{ kg} \quad (59)$$

met:  $\Phi_m$  : water massa debiet van de produktstroom [kg/h]  
 $t$  : operatie tijd [h]

De hoeveelheid zeoliet 4A ( $M_z$ ) die moet worden gebruikt kan als volgt worden bepaald:

$$M_z = M_w / C_w = 0.4128 / 0.2 = 2.064 \text{ kg} \quad (60)$$

met:  $C_w$  : 20%, water capaciteit van de zeoliet 4A [-]

De pakkingsinhoud ( $V_p$ ) van de kolom staat hieronder vermeld:

$$V_p = M_z / (\rho_z * \varepsilon) = 2.064 / (1270 * 0.5) = 0.00325 \text{ m}^3 \quad (61)$$

met:  $\rho_z$  : 1270, dichtheid van droge zeoliet 4A [kg/m<sup>3</sup>]  
 $\varepsilon$  : 0.5, porositeit van de gepakt bed [-]

De diameter van de kolom (D) en de kolomhoogte (H) kunnen berekend worden via:

$$V_p = 0.25 * \pi * D^2 * 0.8H \quad (62)$$

$$H = 3 * D \quad (63)$$

Er is aangenomen dat de top- en bodem secties samen 20% van de kolomhoogte bedragen en de kolom diameter een derde van de kolomhoogte is. Dit levert de volgende resultaten:

$$D = 0.12 \text{ m}$$

$$H = 0.36 \text{ m}$$

Voor de regeneratie wordt droge lucht van 200°C gebruikt. De vochtigheid van deze lucht bedraagt 0.006 kg waterdamp/kg droge lucht. De uitgaande lucht heeft een vochtigheid van 0.03 kg water/kg droge lucht.

De hoeveelheid (hete) lucht ( $M_1$ ) die moet worden gebruikt om het zeoliet te regenereren wordt hieronder berekend:

$$M_1 = M_w / (H_{12} - H_{11}) = 0.4128 / (0.03 - 0.006) = 17.2 \text{ kg} \quad (64)$$

met :  $H_{11}$  : 0.006, ingaande vochtgehalte van lucht [kg/kg]  
 $H_{12}$  : 0.03, uitgaande vochtgehalte van lucht [kg/kg]

Aangezien de kolom 48 uur continu wordt geregenereerd is er dus 0.36 kg/h droge lucht nodig.

De specificatielijst van de zeolietkolommen staan vermeld in bijlage 11.

## 4.12 Ontwerp van de droger

De droger is een roterende droger met direct contact tussen de te drogen massa en de warme luchtstroom. Volgens Coulson en Richardson<sup>(1)</sup> kan voor dit type droger een verdampingscapaciteit van 10 kg/m<sup>3</sup>h genomen worden. Als het verdampingsvermogen van de droger (zie volgende alinea) bekend is kan het benodigde volume berekend worden volgens:

$$V = P_v / P_c \quad (65)$$

Hierin geldt:  $V$  : volume van de droger [m<sup>3</sup>]  
 $P_v$  : verdampingsvermogen [kg/s]  
 $P_c$  : verdampingscapaciteit [kg/m<sup>3</sup>s]

Aangenomen wordt dat er volledige verdamping optreedt van de vloeistof afkomstig van de te drogen massa. Dit houdt in dat het verdampingsvermogen gelijk kan worden gesteld aan de ingaande vloeistofstroom. Voor een roterende droger met directe verwarming geeft Bruinsma<sup>(11)</sup> een typische lengte-diameter verhouding van 5-8. Voor deze verhouding is een waarde van 6 gekozen.

Het roteringsvermogen van de droger kan berekend worden volgens een algemene benadering:

$$0.5 D^2 < P < 1 D^2 \quad (66)$$

Gekozen wordt voor  $P = 0.75 D^2$

waarbij:  $P$  : roteringsvermogen van de droger [Btu/s]  
 $D$  : diameter van de droger [ft]

Enkele gegevens voor het berekenen van de benodigde luchtstroom voor het droogproces staan hieronder vermeld. Deze gegevens worden gebruikt in vergelijkingen (67) t/m (73).

$T_{\text{natte massa,in}}$	= temperatuur van de ingaande natte massa	[K]
$T_{\text{droge massa,uit}}$	= temperatuur van de uitgaande droge massa	[K]
$T_{\text{lucht,in}}$	= temperatuur van de ingaande lucht	[K]
$T_{\text{lucht,uit}}$	= temperatuur van de uitgaande lucht	[K]
$T_{\text{vap,water}}$	= verdampingstemperatuur van water	[K]
$C_{\text{p,zout}}$	= warmtecapaciteit van het gebruikte zout	[kJ/kgK]
$C_{\text{p,droge lucht}}$	= warmtecapaciteit van droge lucht	[kJ/kgK]
$C_{\text{p,water}}$	= warmtecapaciteit van water	[kJ/kgK]
$C_{\text{p,waterdamp}}$	= warmtecapaciteit van waterdamp	[kJ/kgK]
$\Delta H_{\text{vap(water bij 373 K)}}$	= verdampingsenthalpie van water bij 373 K	[kJ/kg]
luchtvochtigheid ( $\Upsilon$ )	= hoeveelheid water in lucht 0.006	[kg /kg]

Als referentietemperatuur  $T_R$  wordt 273K gekozen.

De benodigde luchtstroom kan als volgt berekend worden:

\*Energie in

-van lucht:  $Q_{\text{lucht,in}}$

Stel flow van ingaande lucht =  $m_{\text{in}}$  kg/s

$$Q_{\text{lucht,in}} = [(m_{\text{in}} * C_{\text{p,droge lucht}}) + (\Upsilon * m_{\text{in}} * C_{\text{p,waterdamp}})] (T_{\text{lucht,in}} - T_R) \quad (67)$$

-van natte massa:  $Q_{\text{natte massa,in}}$

Stel: \* massastroom van vloeistof =  $m_l$   
\* massastroom van droge stof (zout) =  $m_s$ .

Water is in vergelijking tot de andere vloeistoffen in grote hoeveelheden aanwezig, zodat kan worden aangenomen:  $C_{\text{p,vloeistof}} = C_{\text{p,water}}$ .

$$Q_{\text{natte massa,in}} = [(m_l * C_{\text{p,water}}) + (m_s * C_{\text{p,zout}})] (T_{\text{natte massa,in}} - T_R) \quad (68)$$

*\*Energie uit*

-van lucht:  $Q_{\text{lucht,uit}}$

De energie van de uitgaande lucht waarbij wordt uitgegaan dat de vochtigheid gelijk is aan die van de ingaande luchtstroom wordt als volgt berekend :

$$Q_{\text{lucht,uit,1}} = [(m_{\text{in}} * C_{p,\text{droge lucht}}) + (\gamma * m_{\text{in}} * C_{p,\text{waterdamp}})](T_{\text{lucht,uit}} - T_{\text{R}}) \quad (69)$$

De hoeveelheid vloeistof afkomstig van de ingaande natte massa wordt volledig verdampt. De energie afkomstig van de verdampte vloeistof bedraagt :

$$Q_{\text{lucht,uit,2}} = m_{\text{l}} [C_{p,\text{water}}(T_{\text{vap,water}} - T_{\text{R}}) + \Delta H_{\text{vap}} + C_{p,\text{waterdamp}}(T_{\text{lucht,uit}} - T_{\text{R}})] \quad (70)$$

Nu dit bekend is kan de volgende vergelijking worden opgesteld:

$$Q_{\text{lucht,uit}} = Q_{\text{lucht,uit,1}} + Q_{\text{lucht,uit,2}} \quad (71)$$

-droge massa:  $Q_{\text{droge massa,uit}}$

De droge massa bevat geen vloeistof meer, zodat de energie van de droge massa als volgt kan worden bepaald:

$$Q_{\text{droge massa,uit}} = (m_{\text{s}} * C_{p,\text{zout}})(T_{\text{droge massa,uit}} - T_{\text{R}}) \quad (72)$$

*\*Warmtebalans*

Aangenomen wordt dat er een energieverlies optreedt van 20 kJ/kg verbruikte lucht. Het totale energieverlies is dus  $20m_{\text{in}}$ .

Met onderstaande warmtebalans kan de ingaande luchtstroom  $m_{\text{in}}$  worden berekend:

$$Q_{\text{lucht,in}} + Q_{\text{natte massa,in}} = Q_{\text{lucht,uit}} + Q_{\text{droge massa,uit}} + 20m_{\text{in}} \quad (73)$$

De gegevens en resultaten van de berekeningen staan vermeld in tabellen 25 en 26.

Tabel 25: Gegevens en resultaten van de Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-droger

Apparaatnummer Benaming Type	M74 Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -Droger Roterende droger
$C_{p,zout}$ [kJ/kgK]	0.90
$C_{p,droge\ lucht}$ [kJ/kgK]	1
$C_{p,water}$ [kJ/kgK]	4.18
$C_{p,waterdamp}$ [kJ/kgK]	2.01
luchtvochtigheid ( $\Upsilon$ ) [kg /kg]	0.006
$\Delta H_{vap(water\ bij\ 373\ K)}$ [kJ/kg]	1942
$T_{vap,water}$ [K]	373
$T_{natte\ massa,in}$ [K]	295
$T_{natte\ massa,uit}$ [K]	300
$T_{lucht, in}$ [K]	473
$T_{lucht, uit}$ [K]	400
Verdampingsvermogen [kg/s]	1.58e-3
Volume [m <sup>3</sup> ]	0.57
Lengte [m]	2.98
Diameter [m]	0.50
Roteringsvermogen [kW]	1.113
Ingaande massastroom [kg/s]	3.33
Ingaande Luchtstroom [kg/s]	1.42E-1
Druk [bar]	1

Tabel 26: Gegevens en resultaten van de BaF<sub>2</sub>-droger

Apparaatnummer Benaming Type	M86 BaF <sub>2</sub> -droger Roterende droger
$C_{p,zout}$ [kJ/kgK]	0.90
$C_{p,droge\ lucht}$ [kJ/kgK]	1
$C_{p,water}$ [kJ/kgK]	4.18
$C_{p,waterdamp}$ [kJ/kgK]	2.01
luchtvochtigheid ( $\Upsilon$ ) [kg /kg]	0.006
$\Delta H_{vap(water\ bij\ 373\ K)}$ [kJ/kg]	1942
$T_{vap,water}$ K]	373
$T_{materiaal,in}$ K]	343
$T_{materiaal,uit}$ K]	348
$T_{lucht,in}$ K]	423
$T_{lucht,uit}$ K]	373
Verdampingsvermogen [kg/s]	1.00E-3
Volume [m <sup>3</sup> ]	0.36
Lengte [m]	2.55
Diameter [m]	0.42
Roteringsvermogen [kW]	0.766
Ingaande massastroom [kg/s]	5.383E-3
Ingaande luchtstroom [kg/s]	7.56E-2
Druk [bar]	1

## 4.13 Ontwerp van de warmtewisselaars

### 4.13.1 Warmtewisselaar

De warmtewisselaars zijn van het 'mantel en buis' type.

De uitgewisselde warmte per tijdseenheid,  $Q$ , wordt door Chemcad bepaald. Hieruit kan de benodigde hoeveelheid koelwater, die van een temperatuur  $T_1$  naar  $T_2$  wordt opgewarmd, berekend worden:

$$Q = \phi_{m,koelw} * C_{p,koelw} * \Delta T_{koelw} \quad (74)$$

met:  $Q$  : warmtecapaciteit [W]  
 $\phi_{m,koelw}$  : massastroom koelwater [kg/s]  
 $C_{p,koelw}$  : warmtecapaciteit van koelwater [J/kg C]  
 $\Delta T_{koelw}$  :  $T_2 - T_1$  [°C]

Om de grootte van het warmtewisselend oppervlak te schatten is gebruik gemaakt van de volgende formule:

$$Q = U * A * \Delta T_m \quad (75)$$

Hierin geldt:  $U$  : totale warmteoverdrachtscoëfficiënt [W/m<sup>2</sup> C]  
 $A$  : warmtewisselend oppervlak [m<sup>2</sup>]  
 $\Delta T_m$  : gemiddelde temperatuurverschil [°C]

Voor de waarden van  $U$  worden de schattingen uit Coulson en Richardson<sup>(1)</sup> gebruikt (deze waarden staan vermeld in bijlage 17<sup>A-F</sup>).

Het logaritmisch temperatuurverschil bij tegenstroom luidt:

$$\Delta T_{ln} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)}} \quad (76)$$

De symbolen betekenen het volgende:

$T_1$  : ingaande temperatuur mantelzijde [°C]  
 $T_2$  : uitgaande temperatuur mantelzijde [°C]  
 $t_1$  : ingaande temperatuur buiszijde [°C]  
 $t_2$  : uitgaande temperatuur buiszijde [°C]



Vergelijking (76) wordt in de praktijk vermenigvuldigd met een correctiefactor, omdat deze alleen bij volledige tegenstroom geldt. De nieuwe temperatuurverandering wordt dan:

$$\Delta T_m = F_t \cdot \Delta T_{lm} \quad (77)$$

De correctiefactor  $F_t$  is een functie van de vloeistoftemperatuur in de mantel en in de buis, en het aantal mantel en buis passages. Het wordt gecorreleerd als een functie van twee dimensieloze temperatuurverhoudingen. Deze worden in vergelijkingen (78) en (79) vermeld.:

$$R = (T_1 - T_2) / (t_2 - t_1) \quad (78)$$

$$S = (t_2 - t_1) / (T_1 - t_1) \quad (79)$$

Voor een "1 mantel : 2 buis passage" warmtewisselaar, wordt de correctiefactor gegeven door:

$$F_t = \frac{\sqrt{(R^2 + 1)} \ln \left[ \frac{(1 - S)}{(1 - RS)} \right]}{(R - 1) \ln \left[ \frac{2 - S[R + 1 - \sqrt{(R^2 + 1)}]}{2 - S[R + 1 + \sqrt{(R^2 + 1)}]} \right]} \quad (80)$$

Deze correctiefactor ligt in de praktijk bij een goed ontwerp boven de 0.75.

Wanneer het warmtewisselend oppervlak  $A$  bekend is, kan het aantal buizen worden berekend via:

$$N_t = A / A_b \quad (81)$$

Hierin geldt de volgende vergelijking voor het oppervlak van één buis:

$$A_b = L \cdot \pi \cdot d_o \quad (82)$$

waarbij:	$N_t$	: aantal buizen	[-]
	$A_b$	: oppervlakte van een buis	[m <sup>2</sup> ]
	$L$	: lengte van een buis	[m]
	$d_o$	: buitendiameter van de buis	[m]

De bundeldiameter is afhankelijk van zowel het aantal buizen als het aantal buis passages. De buizen in de warmtewisselaar zijn gerangschikt volgens een driehoekig patroon. Voor de diameter van de buis geldt dan:

$$D_b = d_o (N_t / K_1)^{1/n_1} \quad (83)$$

De waarden van  $K_1$  en  $n_1$  voor een "1 mantel : 2 buis passages" warmtewisselaar zijn respectievelijk 0.249 en 2.207.

De specificatielijsten van de warmtewisselaars staan in bijlage 17<sup>A-F</sup>.

### 4.13.2 Condensor

De gekozen configuratie is vertikaal, met condensatie in de buizen en koelmedium in de mantel. Aangenomen wordt dat de verzadigde damp condenseert bij een constante temperatuur en druk. Het ontwerp van de condensor verloopt volgens het principe van de warmtewisselaar.

### 4.13.3 Reboiler

De gebruikte reboilers zijn van het type 'forced-circulation reboilers' en 'thermosyphon reboilers'. Het eerste type is geschikt voor visceuse vloeistoffen en opereert bij lage druk. Een nadeel van dit type is dat een pomp vereist is en de kosten van het pompen nogal hoog liggen. Het tweede type is niet geschikt voor zeer visceuse vloeistoffen en operaties bij drukken beneden 0.3 bar. Het ontwerp van de reboiler is hetzelfde als die van de warmtewisselaar.

## 4.14 Ontwerp van de pompen

Voor het verpompen van de vloeistoffen worden twee soorten pompen toegepast. Deze zijn de centrifugaal pomp en de pistonpomp. Het eerste type is geschikt voor het transporteren van vloeistoffen met zeer uiteenlopende eigenschappen. Het tweede type is ontwikkeld voor het verpompen van corrosieve vloeistoffen, of suspensies met schurende vaste stoffen. Voor beide soorten pompen kan het benodigde vermogen berekend worden met de volgende formule (De Graauw et.al.<sup>(6)</sup>):

$$P = \frac{\Delta p \phi_v}{\eta} \quad (84)$$

met :	$\phi_v$	: volumestroom	[m <sup>3</sup> /s]
	$\Delta p$	: drukverschil	[Pa]
	$\eta$	: rendement van de pomp	[-]

Het rendement van de pompen wordt op 0.75 gesteld.

De specificatielijsten van de pompen staan in bijlage 7<sup>A-J</sup>.

---

## 4.15 Berekening van de geleverde jaarproductie en zuiverheid

De simulatie van het proces leverde een totale produktstroom van 12.5888 kg/hr, met de volgende samenstelling:

Mandelonitril	12.3614 kg/hr	98.194%
Water	0.0430 kg/hr	0.342%
Citroenzuur	0.1621 kg/hr	1.288%
Benzaldehyde	0.0044 kg/hr	0.035%
Benzoëzuur	0.0120 kg/hr	0.095%
Zwavelzuur	0.0059 kg/hr	0.047%

Uit bovenstaand overzicht volgt dat de zuiverheid 98.2 % is en dat de jaarproductie 102.6 ton/jaar (uitgaande van 8150 productie-uren per jaar) bedraagt.

Tijdens dit proces is de hoeveelheid geproduceerd bariumfluoride 18.9514 kg/hr. Dit komt overeen met een jaarproductie 154.5 ton/jaar. De zuiverheid bedraagt 100%.

## 5 Massa- en warmtebalans

### 5.1 Massabalans

De massabalansen van het gehele proces staan vermeld in de tabellen in bijlage 4<sup>A-T</sup>.

Een aantal stromen in deze balans worden batchgewijs toegevoegd.

Dit zijn de volgende stromen (hierbij staan ook de tijden van toevoeging vermeld):

- \* Stroom 5 : 2.5 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 6 : 2.5 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 7 : 2.5 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 20 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 21 : 8 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 22 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 94 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 95 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 96 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 97 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde
- \* Stroom 98 : 37 uur per 48 uur heeft deze een waarde

(Voor een duidelijk overzicht is dit ook nog in bijlage 4<sup>A-T</sup> van de massabalans vermeld.)

### 5.2 Warmtebalans

De warmtebalans van het gehele proces staat vermeld in de tabellen in bijlage 5<sup>A-C</sup>.

Hier geldt hetzelfde als bij de massabalans al beschreven staat, namelijk dat een aantal stromen maar een beperkte tijd een waarde heeft. (Voor de stromen en de tijden, zie de tekst van hoofdstuk 5.1 hierboven)

De energieën van de stromen zijn met de volgende formule berekend:

$$\Delta H = \phi_m * C_p * \Delta T + \Delta H_{VAP} * \phi_m + \Delta H_{form} * \phi_m \quad (85)$$

Hierin geldt:	$\Delta H$	: energie	[kJ/sec]
	$\phi_m$	: massa stroom	[kg/sec]
	$C_p$	: warmte capaciteit	[kJ/kmol*K]
	$\Delta T$	: temperatuurverschil	[K]
	$\Delta H_{VAP}$	: verdampingsenthalpie	[kJ/kg]
	$\Delta H_{form}$	: vormingsenthalpie	[kJ/kg]

De waarden voor de  $C_p$ ,  $\Delta H_{\text{VAP}}$  en  $\Delta H_{\text{form}}$  voor alle componenten zijn uit Chemcad gehaald. Deze waarden waren voor mandelonitril niet bekend, daarom zijn hiervan schattingen gemaakt op basis van de aanwezige karakteristieke groepen.

Als referentietemperatuur is 0K genomen.

### 5.3 Totaal overzicht

Het totaal overzicht van de massa- en energiebalans staat vermeld in bijlage 6<sup>A-1</sup>.

Aangezien het proces continu is en er een batchgewijze opwerking in plaatsvindt moeten deze batchgewijze stromen worden omgerekend naar een continue waarde (Een voorbeeld berekening staat in bijlage 6<sup>1</sup>). Dit zodat alle waarden kunnen worden opgeteld en een kloppende massa en energiebalans kan worden verkregen.

Er is hier gekozen om de balansen op deze manier te transformeren in plaats van het batchgewijze deel van het proces om te rekenen naar kg/batch.

## 6 Procesbeheersing

### 6.1 Inleiding

Als de fabriek draait moet het proces aan een aantal voorwaarden voldoen. Deze voorwaarden kunnen van verschillende aard zijn, namelijk:

- \* technologisch
- \* economisch
- \* maatschappelijk

Een aantal van deze voorwaarden zijn produkt specificaties, randvoorwaarden van het proces, veiligheids- en milieutechnische voorwaarden. Aangezien deze voorwaarden er zijn moet er een continu controlesysteem worden aangebracht.

Er zijn drie factoren waarvoor dit controlesysteem erg van belang is. Deze zijn:

- \* de onderdrukking van verstoringen van buitenaf
- \* zorgen dat er stabiliteit is in het proces
- \* optimaliseren van het proces

Aan deze eisen kan worden voldaan met het controlesysteem dat in het procesflowsheet is getekend (bijlage 1). Dit controlesysteem wordt hieronder beschreven.

### 6.2 Procescontrole

In de stromen die het proces in gaan (links in het procesflowsheet (bijlage 1A)) is na iedere centrifugaalpomp een flow controler (FC) ingebracht. Dit is gedaan aangezien er van deze componenten een continue vaste stroom naar de apparaten toe moest.

In de stromen na iedere warmtewisselaar zijn temperatuur controlers (TC) aangebracht. Als de temperatuur verandert zorgt de koppeling naar de regelklep in de koelwater- of stroom-stroom ervoor dat de temperatuur zodanig wordt geregeld dat deze weer de goede waarde krijgt.

In het mengvat van de bariumnitraat oplossing, V6, is een level controler (LC) aangebracht welke is verbonden met een regelklep in de leiding (stroom 7) van V6 naar de  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ -reactor, R67.

In het mengvat van de natriumhydroxide oplossing, V10, is een level controler (LC) aangebracht welke is verbonden met een regelklep in de leiding (stroom 11) van V10 naar de enzymreactor, R22. In V10 is tevens een pH controler (pHC) ingebracht aangezien er in dit vat een oplossing van 2 molair NaOH moet zitten. Deze controler is gekoppeld naar de regelklep in de natriumhydroxide aanvoer.

In het mengvat van de citroenzuur oplossing, V14, is een level controler (LC) aangebracht welke is verbonden met een regelklep in de leiding (stroom 15) van V14 naar de enzymreactor, R22.

In V14 is tevens een pH controler (pHC) ingebracht aangezien er in dit vat een oplossing van citroenzuur moet zitten. Deze controler is gekoppeld naar de regelklep in de citroenzuur aanvoer.

In de stroom die de benzaldehydekolom, T27, in gaat (stroom 17) is een flowrate controler (FRC) aanwezig die gekoppeld is met de regelklep in dezelfde stroom. Dit om te zorgen dat de stroom die T27 in gaat gelijk blijft. In de bodemsectie van deze kolom is een temperatuur controler (TC) aangebracht. Als de temperatuur geen goede waarde heeft dan kan deze geregeld worden met behulp van een regelklep in de stroomaanvoer naar de reboiler. In de bodemsectie is ook een level controler (LC) aanwezig welke verbonden is met de leiding (stroom 33) die een afvalstroom afvoert.

In de stroom uit de top van T27 (stroom 23) is een pressure controler (PC) aanwezig die ervoor zorgt dat als de druk verandert dat het koelwater van H28 ook zodanig verandert, door middel van een regelklep, dat de druk weer op het goede peil komt. In de topaccumulator, V29, is een level controler (LC) aangebracht. Deze level controler bepaalt de hoeveelheid vloeistof die uit de topaccumulator wordt gepompt naar de reactor. In de refluxstroom (stroom 26) wordt een flow controler (FC) aangebracht welke ervoor zorgt dat dat de refluxstroom een constante flow houdt.

In de enzymreactor, R22, is een pH controler (pHC) aanwezig die ervoor zorgt dat de pH in de reactor op de gewenste pH blijft, namelijk 5. Als de pH afwijkt wordt de regelklep in de natriumhydroxide stroom (stroom 11) zo afgesteld dat de pH in de reactor weer terugkomt op zijn oorspronkelijke waarde. In de enzymreactor, R22, is een level controler (LC) aangebracht welke is verbonden met de regelklep in de leiding (stroom 35) van R22 naar het enzymfilter, F26. Komt het niveau in de enzymreactor onder een bepaalde waarde dan wordt de regelklep iets dichtter gedraaid en omgekeerd.

Aangezien de enzymreactor op een temperatuur van 22°C moet worden gehouden is hier een temperatuur controler (TC) aangebracht. Deze is gekoppeld met een regelklep in de koelwaterstroom. Als de temperatuur stijgt kan de regelklep verder worden opengezet en wordt de temperatuur van de enzymreactor toch op 22°C gehouden.

Uit de enzymreactor moet om de dag een controlemonster worden genomen om te onderzoeken of de concentraties van de uitgangsstoffen en het mandelonitril gelijk blijven. Is dit niet het geval dan zullen de aanvoerstromen moeten worden aangepast.

Voor de mandelonitrilkolom (T47) en voor de waterstoffluoridekolom (T56) gelden dezelfde regelingen als die aangebracht waren bij de benzaldehydekolom (T27), daarom worden deze hier niet nogmaals behandeld.

In de bodem van de verdamper (V39) wordt een temperatuur controller (TC) aangebracht. Deze is gekoppeld naar de regelklep in de stoomaanvoer naar de verdamper. Als de temperatuur te laag wordt, wordt de regelklep meer opengezet en neemt de stoomflux toe en gaat de temperatuur weer omhoog. Ook is hier weer een level controller (LC) aanwezig om te voorkomen dat de verdamper droogkookt of verzuipt. Hiertoe is deze controller gekoppeld met een regelklep in de afvoerstream van de bodem van de verdamper (stroom 77). Aan de top van de verdamper komt een gas uit. Een pressure controller (PC) is daarom noodzakelijk. Deze is gekoppeld naar een regelklep in de koelwater-stroom van warmtewisselaar 40. Als de druk te hoog wordt, wordt er meer koelwater toegevoegd, waardoor de gasstroom sneller zal condenseren. Op deze klep in de koelwaterstroom is ook een temperatuur controller (TC) gekoppeld.

Het water regelvat (V42) heeft een level controller (LC) die gekoppeld is met een aanvoerstream van water (stroom 8). Er komt alleen water het regelvat in als het niveau hierin daalt. Dit vat is namelijk aanwezig voor de massabalans van het water. In de stroom die V42 uit gaat (stroom 73) moet een flow controller (FC) aanwezig zijn aangezien er uit V42 een continue stroom moet worden doorgepompt naar de enzymreactor (dit is een recycle).

In het MTBE regelvat (V64) moeten dezelfde regelingen worden aangebracht als bij het water regelvat. De MTBE regelstroom (stroom 18) heeft hier echter al een kleine waarde.

In de  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$  reactor hoeft geen level controller te worden aangebracht aangezien dit vat gevuld blijft met vloeistof terwijl er een gasstroom doorheen wordt geleid. Hier is wel een temperatuur controller (TC) aanwezig omdat de oplossing in deze reactor op  $70^\circ\text{C}$  moet blijven. Deze controller is gekoppeld naar een regelklep in de verwarmingswaterstroom (stroom 64). In deze stroom moet een flow controller (FC) staan aangezien hier een continue stroom met constante waarde uit V69 moet worden gepompt. Dit vat heeft geen level controller nodig aangezien de verwarmingswaterstroom steeds weer wordt hergebruikt. Uit de  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$  reactor komt een gasstroom met een bepaalde druk. In deze stroom (stroom 60) moet dus een pressure controller (PC) welke gekoppeld is met de regelklep in de koelwaterstroom van warmtewisselaar 68.

Als na 48 uur de  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$  reactor wordt opgewerkt moet hieruit een constante stroom worden gepompt. Om deze stroom constant te houden moet een flow controller (FC) worden aangebracht in de stroom van R67 naar het bariumfluoride filter, F85.

In de slurymenger, R78, en de ontwateringsreactor moeten evenals bij de enzymreactor een level controller en een temperatuur controller worden aangebracht. Aangezien dit bij de enzymreactor al uitvoerig beschreven staat wordt dit niet nogmaals gedaan.

In het opvangvat van M73 moet een level controller (LC) worden aangebracht aangezien voor de transportschroef een bepaalde hoogte van het zout vereist is wil deze het zout nog kunnen transporteren. Deze controller is gekoppeld met een regelklep in de afvoerstream van de transportschroef (stroom 82).

Na het zoutfilter (F72) wordt de mandelonitrilstream gesplitst in een produkt deel en een interne recycle naar de slurymenger. In deze beide stromen moet een flow controller (FC) worden aangebracht om ervoor te zorgen dat deze stromen een constante waarde behouden.



## 7 Procesveiligheid

### 7.1 Inleiding

Een duidelijk overzicht van de aanwezige risico's op het gebied van veiligheid, gezondheid en milieu is essentieel om tot een veilig en betrouwbaar procesontwerp te komen. De grootte van de aanwezige risico's hangen in de eerste plaats af van de eigenschappen van de in het proces betrokken componenten en van de schaal waarop deze gebruikt worden. In de tweede plaats zijn ook de processtructuur en de procescondities van grote invloed op de grootte van de risico's.

De plaatsing van dit hoofdstuk suggereert misschien anders, maar de veiligheidsaspecten zijn reeds vanaf het begin meegenomen in het fabrieksvoorontwerp. Dit blijkt alleen al uit de proceskeuze (batch vs continu). Echter, ook als de processtructuur globaal vastgelegd is dient nagegaan te worden waar nog eventuele verbeteringen en aanpassingen aangebracht kunnen worden om een optimale procesveiligheid te garanderen. In dit hoofdstuk zal worden ingegaan op de aanwezige gevaren. Tevens is een beperkte HAZOP-analyse uitgevoerd om de kritieke eenheden in het proces te achterhalen.

De HAZOP-analyse is opgesteld volgens de richtlijnen van het dictaat van Bibo en Lemkowitz<sup>(8)</sup>.

### 7.2 Toxische eigenschappen

Veruit de meest toxische component in het proces is waterstoffluoride. Het inademen van zeer lage concentraties van dit gas kan al fataal zijn. Dit betekent dat lekken in de procesapparatuur en de leidingen ten alle tijden voorkomen dienen te worden, een goede isolatie van alle apparaten en processtromen is dus zeer belangrijk. De milde proces condities ( $P_{\max} = 1 \text{ bar}$ ,  $T_{\max} = 70^\circ \text{C}$ ) en kleine processtromen zullen echter in geval van een lek de spreiding van gas beperken. Benzaldehyde is weliswaar carcinogeen, maar vormt geen acuut gevaar voor de gezondheid. Onderhoud (reiniging en reparatie) dient met uiterste zorgvuldigheid uitgevoerd te worden. Gedacht moet worden aan het gebruik van beschermende kleding en gasmaskers.

### 7.3 Brand en explosiegevaar

Het zeer vluchtige en toxische waterstofcyanide is ook uiterst brandgevaarlijk en explosief. De milde procescondities ( $P_{\max} = 1 \text{ bar}$ ,  $T_{\max} = 70^\circ \text{C}$ ) en de kleine processtromen maken de kans op brand of explosies echter uiterst gering. Mocht toch brand uitbreken dan dienen uiteraard alle aanvoerstromen gestopt te worden. De fabriek moet vervolgens geëvacueerd worden.

## 7.4 Milieukundige aspecten

Vanwege de betrekkelijke kleinschaligheid en de over het algemeen goede bio-afbreekbaarheid (benzaldehyde en benzoëzuur iets minder) van de verschillende componenten zullen er in het geval van calamiteiten geen directe gevaren voor het milieu zijn.

Ook in de normale procesvoering zijn de aanwezige afvalstromen goed te verwerken door een afvalwaterzuivering.

## 7.5 HAZOP-analyse

Om de kritieke eenheden in het proces te achterhalen is een beperkte HAZOP-analyse uitgevoerd. De HAZOP is in zoverre beperkt dat alleen rekening gehouden is met het uitvallen van de voornaamste apparatuur in het proces. Er is dus geen rekening gehouden met defecten van de regelapparatuur en de sluitingsmechanismen. Ook invloeden van bijvoorbeeld het wisselen van de seizoenen op de procesvoering is niet meegenomen.

De acties die in de onderstaande HAZOP-tabellen vermeld staan zijn in chronologische volgorde weergegeven. Er wordt pas overgegaan op een "plant shutdown" indien de voorgaande acties falen.

HTA: hoge temp. alarm  
LTA: lage temp. alarm  
SA : defecte roerder alarm  
LFA: lage debiet alarm  
HLA: hoog niveau alarm  
LLA: laag niveau alarm  
HPA: hoge druk alarm  
HpHA: hoge pH alarm  
LpHA: lage pH alarm

Tabel 27: HAZOP-analyse van de benzaldehyde kolom (T27)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
1	Geen	Geen benzaldehyde aanvoer stroom	-Defecte aanvoer pomp (P16)	- Geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- LLA in topaccumulator (V29) - LLA in kolom (T27) - kolom shutdown - repareer/vervang pomp in 1uur* - plant shutdown
2	Geen	Geen benzaldehyde reflux	- Defecte reflux pomp (P30)	- Geen zuivere benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- HLA in topaccumulator (V29) - kolom shutdown (T27) - repareer/vervang pomp in 1uur - plant shutdown
3	Geen	Geen condensatie topstroom	- Defecte condensor (defecte koelwater-pomp) (H28)	- Geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- HTA na condensor - HTA/HPA in topaccumulator - kolom shutdown (T27) - repareer condensor in 1uur - plant shutdown
4	Geen	Geen verdamping bodemstroom	- Defecte reboiler (geen stoom) (H32)	- Geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- LTA in kolom (T27) - HLA in kolom (T27) - LLA in topaccumulator (V29) - kolom shutdown - repareer reboiler in 1uur - plant shutdown
5	Geen	Geen benzoëzuur afvoer stroom	- Defecte afvoerpomp (P33)	- Kolom verzuipt waardoor uiteindelijk geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- HLA in kolom (T27) - kolom shutdown - repareer/vervang pomp in 1 uur - plant shutdown
6	Geen	Geen benzaldehyde afvoer stroom	- Defecte benzaldehyde afvoer pomp (P31)	- Geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- HLA in topaccumulator (V29) - kolom shutdown - repareer/vervang pomp in 1 uur
7	Meer	Drukverhoging in destillatiekolom	- Defecte vacuumzuiger -Lek	- Geen benzaldehyde voeding naar de enzymreactor (R22)	- HPA in kolom (T27) - plant shutdown

\* Het reactorvolume is ten opzichte van de voedingsstroom is zeer groot. Uitgaande van het vloeistofvolume in de enzymreactor duurt het (indien de afvoer van de enzymreactor gesloten is) ongeveer 4,7 uur voor de reactor volgelopen is. Omgekeerd duurt het leeglopen van de reactor ongeveer 11 uur. Wanneer de toevoer van (een) bepaalde component(en) naar de reactor stopt is het moeilijk om exact in te schatten na hoeveel tijd de 98% zuiverheid van het geleverde produkt in het geding komt.

Na 1 uur zal de benzaldehyde concentratie in de reactor nog geen 10% afgenomen zijn. Het is aannemelijk dat over dit tijdsbestek de invloed op de conversiegraad en de uiteindelijke zuiverheid van het produkt verwaarloosbaar is. Op basis van deze gronden is besloten om 1 uur hersteltijd te bieden alvorens overgegaan wordt op een (financieel ongunstige) plant shutdown. In de praktijk zouden ook langere hersteltijden mogelijk kunnen zijn.

Tabel 28: HAZOP-analyse van de enzymreactor (R22)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
8	Geen	Geen afvoer stroom van enzymreactor (R22)	I Defecte enzymreactor afvoerpomp (P24) II Verstopt enzym filter (F26)	-Verhoging vloeistofniveau in enzymreactor	- LFA na enzymfilter (F26) - HLA in enzymreactor (R22) - sluit afvoer af I repareer/vervang pomp in 4 uur*. II repareer wisselmechanisme in 4 uur (zie ook 17) - plant shutdown
9	Geen	Geen menging	-Defecte roerder	- Verlaagde temperatuur door koelwater - Lagere omzetting	- SA - LTA in enzymreactor (R22) - sluit afvoer af - repareer roerder in 4 uur. - plant shutdown
10	Geen	Geen water recycle stroom naar enzymreactor (R22)	- Defecte water recycle pomp (P43)	- Verlaging vloeistofniveau in enzymreactor - Lagere ee - Lagere omzetting	- HLA in water regelvat (1m <sup>3</sup> ) - LLA in enzymreactor (R22) - repareer/vervang water recycle pomp in 4 uur. (P43) - plant shutdown
11	Geen	Geen MTBE recycle stroom naar enzymreactor (R22)	- Defecte MTBE recycle pomp (P63)	- Verlaging vloeistofniveau in reaktor - Lagere ee - Mogelijk hogere omzetting	- HLA in MTBE regelvat (1m <sup>3</sup> ) - LLA in enzymreactor (R22) - repareer/vervang MTBE recycle pomp in 4 uur (P63) - plant shutdown
12	Meer	Hogere pH in de enzymreactor (R22)	-Defecte citroenzuurbuffer pomp (P15)	-Lagere ee	- HpHA in de enzymreactor (R22) - Verminder NaOH toevoer - Repareer/vervang pomp (P15)
13	Meer	Hogere temperatuur	I Defecte enzymreactor koelwaterpomp (P25) II Defecte benzaldehyde koeler (H37)	- Geen conversie door produktontleding	I - HTA in enzymreactor (R22) - zet roerder af - sluit enzymreactor afvoer - repareer/vervang koelwaterpomp in 4 uur (P25) - plant shutdown II - HTA na koeler (H37) - sluit benzaldehyde voeding naar benzaldehyde kolom (T27) en enzymreactor (R22) - repareer koeler in 1 uur (H37) - plant shutdown
14	Minder	Minder benzaldehyde aanvoer naar enzymreactor (R22)	I Defecte benzaldehyde destillatie (zie 1 t/m 7) (T27) II Defecte MTBE-recycle pomp (zie 11) (P63)	I Lagere omzetting  II zie 11	I zie 1 t/m 7  II zie 11

15	Minder	Minder HCN toevoer naar enzymreactor (R22)	I Defecte aanvoer pomp HCN (P4) II Defecte HCN recycle pomp (zie 10) (P65)	-Lagere omzetting	I - LFA na pomp (P4) - Repareer/vervang pomp in 1 uur (P4) - plant shutdown II zie 10
16	Minder	Lagere pH in de enzymreactor (R22)	- Defecte NaOH-opl. pomp (P11)	- Lagere omzetting	- LpHA in enzymreactor (R22) - Verminder citroenzuurbuffer toevoer - Repareer/vervang pomp (P11)

\* De produktzuiverheid zal niet in het geding raken. Omdat de reactor binnen 4,7 uur vol loopt wordt een herstelltijd van 4 uur geboden.

Tabel 29: HAZOP-analyse van het enzymfilter (F26)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
17	Geen	Geen vloeistofstroom uit filter (F26)	- Verstopt enzymfilter (F26) door weigering wisselmechanisme	- Verhoging vloeistofniveau in de enzymreactor (R22)	- HLA in enzymreactor(R22) - LFA - Repareer wisselmechanisme in 4 uur - plant shutdown

Tabel 30: HAZOP-analyse van de settler (V38)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
18	Geen	Geen aanvoerstream	I Defecte reactor afvoerpomp (P24) II Verstopt enzymfilter (F26)	- Daling vloeistofniveau settler (V38) - Geen afvoerstromen	- LLA in settler (V38) I zie 8 II zie 17
19	Meer	Hogere pH in waterige fase	-Defecte zuur toevoer pomp (P2)	- Mogelijk lagere ee	- HpHA - Repareer/vervang pomp (P2)

Tabel 31: HAZOP-analyse van de verdamper (V39)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
20	Geen	Geen verdamping	- Geen hete stoom beschikbaar	- Gehele waterstroom komt in de afvalstroom terecht: verlies van recycle water/HCN	- LTA in verdamper (V39) - LPA in verdamper (V39) - LLA in waterregelvat (V42) - Vul water/HCN verlies aan in water regelvat (V42) - Regel hete stoom
21	Geen	Geen afvoer slurry	- Defecte slurry afvoerpomp (P88)	- Verdamper loopt vol met slurry	- HLA in verdamper (V39) - Voer waterstroom vóór verdamper af - LLA in waterregelvat (V42) - Vul water/HCN verlies aan in water regelvat (V42) - Repareer/vervang slurry afvoerpomp (P88)
22	Meer	Drukverhoging in verdamper (V39)	- Ophoping van gas door defect van stroomopwaartse condensor (H40)	- Geen verdere verdamping mogelijk: waterstroom komt in de afvalstroom terecht	- HTA na condensor (H40) - HPA in verdamper (V39) - HTA in verdamper (V39) - HTA in waterregelvat (V42) - HPA in waterregelvat (V42) - LLA in waterregelvat (V42) - Vul water/HCN verlies aan in water regelvat (V42) - Repareer condensor (H40)
23	Meer	Hogere temperatuur	- Ophoping van gas door defect van stroomopwaartse condensor (H40)	- Geen verdere verdamping mogelijk: waterstroom komt in de afvalstroom terecht	- HTA na condensor (H40) - HPA in verdamper (V39) - HTA in verdamper (V39) - HTA in waterregelvat (V42) - HPA in waterregelvat (V42) - LLA in waterregelvat (V42) - Vul water/HCN verlies aan in water regelvat (V42) - Repareer condensor (H40)

Tabel 32: HAZOP-analyse van het water regelvat (V42)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
24	Geen	Geen afvoerstream	-Defecte water recycle-pomp (zie 10) (P43)	- zie 10	-zie 10
25	Geen	Geen (vloeibare) toevoerstream	-Defecte verdamper (V39) en/of defecte condensor (H40) (zie 21 t/m 23)	-zie 21 t/m 23	-zie 21 t/m 23

Tabel 33: HAZOP-analyse van de mandelonitril kolom (T47)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
26	Geen	Geen Organische fase stroom toevoer	I Defecte enzymreactor afvoerpomp (P24) II verstopt enzym-filter (F26)	- Geen verdere destillatie mogelijk	I zie 8 II zie 17
27	Geen	Geen toevoer stroom HF	- Defecte HF pomp (P1)	- Mogelijke ijsafzetting in condensor of topaccumulator resulterend in verstoppingen en verminderde warmteoverdracht	- LFA na HF pomp (P1) - HTA na topcondensor (H48) - LLA in topaccumulator (V49) - HTA in topaccumulator (V49) - HPA in topaccumulator (V49) - kolom shutdown - Sluit enzymreactorafvoer af - Repareer/vervang HF pomp in 4 uur - plant shutdown
28	Geen	Geen reflux stroom	- Defecte reflux pomp (P50)	- Destillatie onmogelijk	- HLA in topaccumulator (V49) - kolom shutdown - Sluit enzymreactorafvoer af - Repareer/vervang pomp in 4 uur - plant shutdown
29	Geen	Geen condensatie topstroom	- Defecte topcondensor (H48)	- Destillatie onmogelijk	- HTA na condensor (H48) - HTA/HPA in topaccumulator - kolom shutdown - sluit enzymreactorafvoer af - repareer condensor in 4 uur - plant shutdown
30	Geen	Geen verdamping bodemstroom	- Defecte reboiler (geen stoom) (H52)	- Destillatie onmogelijk	- LTA in mandelonitrilkolom - HLA in mandelonitrilkolom - LLA in topaccumulator (V49) - Kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer reboiler in 4 uur - plant shutdown
31	Geen	Geen produkt afvoer stroom	- Defecte afvoerpomp (P53)	- Vloeistof niveau in mandelonitrilkolom stijgt	- HLA in mandelonitrilkolom - kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer/vervang pomp in 4 uur - plant shutdown
32	Geen	Geen MTBE/HCN/HF/BENZALDEHYDE afvoerstrom	- Defecte afvoerpomp (P51)	Vloeistofniveau in topaccumulator (V49) stijgt	- HLA in topaccumulator (V49) - kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer/vervang pomp in 4 uur - plant shutdown
33	Meer	Meer druk in destillatiekolom	- Defecte vacuümzuiger - Kolom lek	- Destillatie onmogelijk	- HPA in mandelonitrilkolom - plant shutdown

Tabel 34: HAZOP-analyse van de ontwateringsreactor (R81)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
34	Geen	Geen stroom uit ontwateringsreactor	I Defecte ontwateringsreactor afvoerpomp (P83) II Verstopt Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> filter (F72)	- Verhoging vloeistofniveau in ontwateringsreactor	- LFA na Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -filter - HLA in ontwateringsreactor - sluit afvoer van R81 af I repareer/vervang pomp in 2uur II repareer wisselmechanisme in 2 uur (zie ook 40) -plant shutdown
35	Geen	Geen menging	- Defecte roerder	- Verlaagde temperatuur door koelwater - Verlaagde wateropname	- SA - LTA in ontwateringsreactor - sluit afvoer van R81 af - repareer roerder in 2 uur. - plant shutdown
36	Geen	Geen produktstroom naar ontwateringsreactor	- Defecte destillatie (zie 26 t/m 33)	- Verlaging vloeistofniveau in ontwateringsreactor	- zie 26 t/m 33
37	Geen	Geen zwavelzuur naar ontwateringsreactor	Defecte zwavelzuur aanvoerpomp (P2)	Mogelijke Vorming Nacitraat leidend tot zoutvervuiling	- LFA na zwavelzuuraanvoerpomp (P2) - Repareer/vervang pomp (P2)
38	Geen	Geen zoutslurry naar ontwateringsreactor	Defecte/verstopte zoutslurry pomp van slurymenger (P80)	- Verlaging vloeistofniveau in ontwateringsreactor - Verminderde wateropname	- HLA in slurymenger (R78) - LLA in ontwateringsreactor - sluit afvoer van R78 af - Repareer/vervang pomp in 2 uur - plant shutdown
39	Meer	Meer temperatuur in ontwateringsreactor	I Defecte ontwateringsreactor koelwaterpomp (P82) II Defecte produkt warmtewisselaar (H54) III Verhoogde temperatuur toegevoegd zoutslurry door defecte koeling slurymenger (P79)	-produktontleding gevolgd door verdamping HCN	- HTA/HPA in ontwateringsreactor (R81) I - Zet roerder af - Sluit afvoer R81 af - Repareer/vervang koelwaterpomp in 2 uur (P82) II - HTA na koeler (H54) - Sluit enzymreactor afvoer af - Sluit ontwateringsreactor toevoer af - Repareer koeler (H54) in 4 uur III - HTA in slurymenger(R78) - Sluit zoutslurry toevoer af - sluit ontwateringsreactor (R81) afvoer af - repareer koeling slurymenger in 2 uur (P79) - plant shutdown



Tabel 38: HAZOP-analyse van het Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-filter (F72)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
40	Geen	Geen vloeistofstroom uit Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -filter (F72)	- Verstopt Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -filter door weigering wisselmechanisme	- Verhoging vloeistofniveau in ontwateringsreactor (R81) - Verlaging vloeistofniveau slurrymenger (R78)	- LFA na Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -filter (F72) - HLA in ontwateringsreactor - LLA in slurrymenger (R78) - sluit ontwateringsreactor afvoer af - repareer wisselmechanisme in 2 uur - plant shutdown

Tabel 39: HAZOP-analyse van de Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>-droger (M74)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
41	Geen	Geen nat zoutstroom naar de droger (M74)	Defecte zouttransport-schroef (M73)	- Geen droog zout naar slurrymenger waardoor verlaging van het vloeistofniveau en verdunning optreedt	- LLA in slurrymenger - repareer/vervang transportschroef (M73) - voeg handmatig droog zout aan slurrymenger toe
42	Geen	Geen hete lucht stroom	Defecte luchtpomp (P18)	Slurrymenger wordt vervuild met nat zout	- LFA - Voer nat zout af - Voeg handmatig droog zout toe aan slurrymenger - Repareer luchtpomp(P18)
43	Minder	Lagere temperatuur luchtstroom	Defecte warmtewisselaar (geen stroom) (H46)	Slurrymenger wordt vervuild met nat zout	- LTA na warmtewisselaar - Voer nat zout af - Voeg handmatig droog zout toe aan slurrymenger - Repareer H46

Tabel 40: HAZOP-analyse van de zeolietkolommen (T77)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
44	Geen	Geen wateropnamecapaciteit	falend wisselmechanisme	Slurrymenger wordt vervuild met water	-LFA -repareer wisselmechanisme

Tabel 41: HAZOP-analyse van de slurymenger (R78)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
45	Geen	Geen flow uit slurymenger (R78)	- Defecte/verstopte zoutslurrypomp (zie ook 38) (P80)	-Geen zoutslurry naar ontwateringsreactor: geen ontwatering	-zie 38
46	Geen	Geen menging	-Defecte roerder	-Verlaagde temperatuur door koeling -Ontmenging, waardoor verstoppingen kunnen ontstaan	-SA in slurymenger -LTA in slurymenger -Repareer roerder voordat verstoppingen ontstaan
47	Geen	Geen produktmengstroom naar slurymenger	I Defecte mandelonitrildestillatie (zie 26 t/m 33) II Defecte ontwateringsreactor afvoerpomp (zie 34) (P83) III Verstopt Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> -filter (zie 40) (F72)	- Verlaging vloeistofniveau in slurymenger (R78) - verdikking slurry waardoor mogelijk verstoppingen optreden	I zie 26 t/m 33 II zie 34 III zie 40
48	Geen	Geen droog zout naar slurymenger (R78)	Falende droger (zie 41) (M74)	- Verlaging vloeistofniveau in slurymenger (R78) -Verdunning slurry: minder ontwatering	-zie 41
49	Meer	Hogere temperatuur in slurymenger(R78)	- Defecte slurymenger koelwaterpomp (zie 39) (P79)	ontleding produkt ,gevolgd door verdamping HCN	- zie 39

Tabel 42: HF-kolom (T56)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
50	Geen	Geen aanvoer- stroom	- Defecte aanvoerpomp (P51) en/of falende mandelo-nitrilkolom(zie 26 t/m 33)	- Geen verdere destillatie mogelijk	- zie 26 t/m 33.
51	Geen	Geen reflux stroom	- Defecte afvoerpomp (59)	- destillatie onmogelijk	- HLA in topaccumulator (V58) - kolom shutdown - Sluit enzymreactorafvoer af - Repareer/vervang pomp in 4 uur - plant shutdown
52	Geen	Geen condensatie topstroom	- Defecte topcondensor (H57)	- Destillatie onmogelijk	- HTA na topcondensor (H57) - HTA/HPA in topaccumulator - kolom shutdown - sluit enzymreactorafvoer af - repareer condensor in 4 uur - plant shutdown
53	Geen	Geen verdamping bodemstroom	- Defecte reboiler (geen stoom) (H60)	- Destillatie onmogelijk	- LTA in HF-kolom (T56) - HLA in HF-kolom (T56) - LLA in topaccumulator (V58) - Kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer reboiler in 4 uur - plant shutdown
54	Geen	Geen MTBE/BENZALDE HYDE afvoer stroom	- Defecte afvoerpomp (P61)	- Vloeistof niveau in HF-kolom stijgt	- HLA in HF-kolom (T56) - kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer/vervang pomp in 4uur - plant shutdown
55	Geen	HF/HCN /MTBE afvoerstroom	- Defecte afvoerpomp (P59)	- Vloeistofniveau in topaccumulator (V58) stijgt	- HLA in topaccumulator (V58) - kolom shutdown - Sluit enzymreactor afvoer af - repareer/vervang pomp in 4uur - plant shutdown

Tabel 43: HAZOP-analyse van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor (R67)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
56	Geen	Geen HCN/MTBE flow uit Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor (R67)	Gasophoping door defecte stroomopwaartse condensor (H68)	-Toename druk en temperatuur in de Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor (R67)	- HTA na condensor (H68) - HTA in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor - HPA in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor - HTA in MTBE regelvat(V64) - HPA in MTBE regelvat(V64) - purge gas - Repareer condensor (H68) - Vul HCN/MTBE verlies aan in MTBE regelvat (V64)
57	Geen	Geen menging	- Defecte roerder	- Verlaagde temperatuur - Mogelijk verslechterde HF-verwijdering	- SA in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor (R67) - Repareer roerder - Vervang eventueel sterk met HF-verontreinigd water in waterregelvat (V42)
58	Geen	Geen HF/HCN/MTBE stroom naar Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor	Defecte HF destillatie /afvoerpomp (zie 50 t/m 55) (P59)	- Geen HF-verwijdering	- zie 50 t/m 55
59	Geen	Geen gasvormig HF/HCN/MTBE naar de Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor	Defecte warmtewisselaar/verdamp(er) (geen stoom) (H66)	- Verlies van HCN/MTBE uit het systeem	- LTA na warmtewisselaar(H66) - Repareer warmtewisselaar - Vul verlies HCN/MTBE aan in MTBE regelvat (V64)
60	Minder	Lagere temperatuur in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor	- Defecte Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor opwarmingspomp (P71)	- afkoeling reactor-inhoud: opname MTBE waardoor niveau stijgt.	- LTA in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor - Repareer verwarmingswaterpomp(P71) - Vul eventueel verlies van MTBE aan in het MTBE regelvat(V64)
61	Zowel	Gasvormig HF komt naast HCN/MTBE uit de Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor	HF-opname capaciteit overschreden door defect wisselmechanisme	Vervuiling van het verdere proceswater in het systeem met HF	- Klokalarm in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> - reactor - LpHA in Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -reactor - Repareer wisselmechanisme - Vervang eventueel sterk met HF-verontreinigd water in waterregelvat

Tabel 44 HAZOP-analyse van het MTBE regelvat (V64)

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
62	Geen	Geen afvoerstroam	Defecte MTBE recyclepomp (zie 11) (P63)	Verhoging vloeistofniveau in regelvat(zie 11) (V64)	- zie 11
63	Geen	Geen MTBE/BENZALDEHYDE toevoer van HF-kolom	- Falende destillatie (T56)/ defecte afvoerpomp (P61)(zie 50 t/m 55)	Verlaging vloeistofniveau in het regelvat (V64)	- zie 50 t/m 55
64	Meer	Hogere temperatuur	- Defecte warmtewisselaar (H62) voor MTBE/BENZALDEHYDE na de HF-kolom (T56)	-Temperatuur toename in opvangvat resulterend in temperatuuroename in enzymreactor (R22)	- HTA in regelvat (V64) - Verhoog eventueel koelwaterstroam in enzymreactor (R22) - Repareer warmtewisselaar (H62)
65	Gedeeltelijk	Gedeeltelijk gasvormige (HCN/MTBE) toevoerstroam	- Defecte condensor (zie 56) (H68)	Verhoogde druk en temperatuur	- zie 56

Tabel 45: HAZOP-analyse van de afvalstromen

	sleutelwoord	verstoring	oorzaak	gevolg	actie
66	Meer	Hogere temperatuur. benzoëzuur uit benzaldehyde kolom (T27)	Defecte warmtewisselaars (H34 en H35)	Te hoge temperatuur	- HTA na warmtewisselaars (H34 en H35) - Repareer warmtewisselaars (H34 en H35)
67	Meer	Hogere temp. zoutslurry uit verdamer (V39)	Defecte warmtewisselaars (H44 en H45)	Te hoge temperatuur	- HTA na warmtewisselaars (H44 en H45) - Repareer warmtewisselaars (H44 en H45)

Het zal duidelijk zijn dat de reactoren en de regelvaten een behoorlijke opvangcapaciteit hebben voor veranderende processtromen. Voor een goede procesvoering is koeling van de reactoren en een goede menging echter wel essentieel.

De destillatietorens liggen echter in geval van falende aan- of afvoerpompen, reboilers of condensoren gelijk plat. Voor sommige pompen (bijvoorbeeld voor benzaldehyde aanvoer) is het misschien verstandig om indien in geval van een defect via een omleiding over te schakelen op een tweede (reserve) pomp. Op deze manier kunnen pompdefecten goed opgevangen worden zonder dat dit gevolgen heeft voor de procesvoering.

## 8 ECONOMIE

### 8.1 Inleiding

De beschouwing van de economie wordt aan de hand van literatuur [1], [7] en [9] uitgevoerd. Met behulp van een ruw model kan de rentabiliteit van de ontworpen fabriek geschat worden.

"Het Best model" wordt toegepast om de verschillende bijdragen tot de jaarlijkse totale kosten te bepalen met de volgende vergelijking:

$$K_T = a \cdot K_p + b \cdot K_L + c \cdot I_{\text{tot}} \quad (86)$$

met:  $K_p$  : produktie-volume afhankelijke kosten [kf]  
 $K_L$  : semi-variabele kosten [kf]  
 $I_{\text{tot}}$  : totale investeringskosten [kf]  
 a, b, c : factoren van "het beste model", a=1.13, b=2.60, c=0.13 [-]

De factoren a, b en c zijn exclusief rente en aflossing, zodat de rente en afschrijving nog apart in rekening moeten worden gebracht.

### 8.2 Produktievolume afhankelijke kosten, $K_p$

De produktievolume afhankelijke kosten worden verdeeld in grond- en hulpstoffen, utilities en de verwerking van de afvalstoffen. De utilities bestaan uit de kosten voor energie, stoom en koelwater. Deze worden op de plant ter beschikking gesteld.

Tabel 46: productievolume afhankelijke kosten ( $K_p$ ) van het proces

Component	Prijs (f/ton)	$\Phi_m$ (ton/jaar)	Kosten (kf/jaar)
HCN	2185.4250	22.5070	49.1874
Benzaldehyde	1809.5200	83.2832	150.7026
Citroenzuur	3000.0000	7.5208	22.5624
NaOH	1352.3800	0.2184	0.2954
MTBE	2773.3300	0.0008	0.0022
(R)-oxynitriase	10000.0000	0.0057	0.5700
Brine water	0.4000 (f/m <sup>3</sup> )	34524.7170	13.8099
Koelwater	0.1000 (f/m <sup>3</sup> )	80929.6989	8.0930
Proceswater	2.5000 (f/m <sup>3</sup> )	16940.7383	42.3518
Zwavelzuur	132.4500	0.1565	0.0207
Stoom	30.0000	140585.4503	4217.5635
HF	2428.2600	27.8461	67.6176
Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	1150.0000	177.5239	204.1640
Lucht	0.0500 (f/m <sup>3</sup> )	5981.0592	231.2864
Electriciteit	0.1300 (f/kwh)	21303.7390 (kwh)	2.7695
N <sub>2</sub> compressie kosten* <sup>1</sup>			10.9216
Verwerkingskosten* <sup>2</sup>			10.0438
Totaal ( $K_p$ )			5021.9179

Hierbij zijn de volgende aannamen genomen:

\*<sup>1</sup> De N<sub>2</sub> compressie kosten van de warmtewisselaar H48 zijn 10.9216 kf/jaar

\*<sup>2</sup> De totale verwerkingskosten zijn 0.2% van de totale productievolume afhankelijke kosten.

### 8.3 Semi-variabele kosten, $K_L$

Deze kosten bestaan uit de loonkosten, onderhoudskosten en royalties. Alleen de loonkosten worden in rekening gebracht.

De loonkosten wordt bepaald via de Wessel-relatie. Deze staat hieronder vermeld::

$$\frac{\text{manuren}}{\text{ton produkt}} = k * \frac{\text{aantal stappen}}{(\text{capaciteit} / \text{dag})^{0.76}} \quad (87)$$

met :	k	: 17, voor een gemengd proces <sup>(7)</sup>	[-]
	aantal stappen	: aantal secties: vooraf, reactie en opwerking, is voor dit proces gelijk aan 3	[-]
	capaciteit/dag	: 0.7560	[ton/dag]

Gebruikmakend van bovenstaande formule komt het aantal manuren per ton geproduceerd produkt op 63.08. Er worden jaarlijks 102.60 ton mandelonitril en 154.45 ton BaF<sub>2</sub> geproduceerd. Dit komt overeen met 16,214.96 manuren. Aangenomen wordt dat de arbeidskosten f 28.15 per manuur zijn. De totale loonkosten komen dan jaarlijks op kf 456.4510.

*functie plaatsen*

### 8.4 De totale investeringskosten, $I_{\text{tot}}$

De investeringskosten worden op twee manieren bepaald. Namelijk volgens:

- \* de methode van Lang en
- \* de methode van Taylor.



### 8.4.1 Methode van Lang

Deze methode stelt dat de belangrijkste investeringen gevormd worden door de apparaten en wordt vaak gebruikt om de orde van grootte van de investeringen te schatten.

De totale investeringen worden als volgt bepaald:

$$I_{\text{tot}} = I_B + I_H + I_L + I_w \quad (88)$$

met :	$I_B$	: 64% van $I_{\text{tot}}$ , investeringen in de proceseenheden inclusief de indirecte bouwkosten	[kf]
	$I_H$	: 16% van $I_{\text{tot}}$ , investeringen in de hulpapparatuur, de off site investeringen en de indirecte kosten daarvan	[kf]
	$I_L$	: 14% van $I_{\text{tot}}$ , investeringen in niet tastbare zaken zoals licenties, pre-operationele kosten en start-up kosten	[kf]
	$I_w$	: 6% van $I_{\text{tot}}$ , werkkapitaal, voorraden, cash, terreinen, etc.	[kf]

Het "fixed capital" wordt in de volgende vergelijking weergegeven:

$$I_f = I_B + I_H = f_1 * I_a \quad (89)$$

met :	$I_f$	: "fixed capital"	[kf]
	$I_a$	: de totale apparaatuurkosten	[kf]
	$f_1$	: "lang-factor", bedraagt 4.7 voor een algemeen biotechnologisch proces	[-]

Het is belangrijk om een zo nauwkeurig mogelijke analyse van de apparaatuurkosten te maken. Hiertoe wordt het WEBCI boek (1994)<sup>(9)</sup> geraadpleegd. Gezien het feit dat de apparaatuurkosten afhankelijk zijn van de capaciteit en de prijs niet direct voor handen is, wordt de volgende formule<sup>(1)</sup> toegepast :

$$C_e = C * S^n * x \quad (90)$$

met :	$C_e$	: aanschafprijs in	[NFI]
	$S$	: karakteristieke afmeting van het apparaat in SI eenheden	
	$n$	: index voor het betreffende apparaat	[-]
	$x$	: 2.8, omrekeningskoers van £ naar $f$	[-]

Tabel 47: schatting apparaatkosten

Apparaat	Capaciteit (m <sup>3</sup> )	Prijs p.e. (kf)	Aantal	Totaal (kf)
V6	8.0000	12.1877	1	12.1877
V10	0.0025	0.2403	1	0.2403
V14	0.0025	0.2403	1	0.2403
R22	3.6360	93.8507	1	93.8507
F26 A/B	1.000 (m <sup>2</sup> )	6.4400	2	12.8800
T27	0.0500	51.4448	1	51.4448
V29	0.0110	0.5846	1	0.5846
V38	0.0435	0.5335	1	0.5335
V42	1.0320	8.9169	1	8.9169
T47	0.0700	40.0370	1	40.0370
V49	0.1440	2.7354	1	2.7354
T56	0.1000	45.1500	1	45.1500
V58	0.012	0.6159	1	0.6159
V64	0.9920	8.7079	1	8.7079
R67 A/B	6.0000	45.8679	2	91.7358
V69	0.3380	1.8257	1	1.8257
F72 A/B	5.0000 (m <sup>2</sup> )	16.9148	2	33.8296
M73	0.1000	0.8792	1	0.8792
M74	4.6800 (m <sup>2</sup> )	33.6450	1	33.6450
T77 A/B	0.0040	14.8800	2	29.7600
R78	0.1000	8.9177	1	8.9177
R81	0.1430	10.2892	1	10.2892
F85 A/B	5.0000 (m <sup>2</sup> )	16.9148	2	33.8296
M86	0.3520 (m <sup>2</sup> )	10.5016	1	10.5016
V39	6.2700 (m <sup>2</sup> )	44.4489	1	44.4489

Tabel 48: schatting warmtewisselaarskosten

Apparaat	Capaciteit (m <sup>2</sup> )	Prijs p.e. (kf)	Aantal	Totaal (kf)
H36	0.0189	1.5248	1	1.5248
H37	0.0299	2.0078	1	2.0078
H41	0.2326	6.8752	1	6.8752
H62	0.3882	9.3488	1	9.3488
H68	0.0261	1.8501	1	1.8501
H34	0.0001	0.0725	1	0.0725
H35	0.0007	0.2128	1	0.2128
H54	0.0335	2.1503	1	2.1503
H44	0.0054	0.7228	1	0.7228
H45	0.0116	1.1400	1	1.1400
H70	0.7423	13.7933	1	13.7933
H23	12.0800	39.2020	1	39.2020
H55	0.5137	11.0598	1	11.0598
H66	0.1808	5.9107	1	5.9107
H46	0.9968	16.4622	1	16.4622
H87	0.4890	10.7376	1	10.7376
H90	1.5010	21.0451	1	21.0451
H28	0.0194	1.5498	1	1.5498
H48	0.9293	15.7839	1	15.7839
H57	1.9970	24.9775	1	24.9775
H32	0.0429	2.4934	1	2.4934
H52	0.3857	9.3126	1	9.3126
H60	1.9690	24.7668	1	24.7668

De totale kosten van pompen in het proces bedragen kf 7.197. (optellen uit tabellen van bijlage 7<sup>A-J</sup>)

De totale apparaatkosten worden kf 807.9841 (opgeteld uit tabel 47), zodat het "fixed capital" kan worden bepaald volgens vergelijking (89). Het "fixed capital" wordt dan:

$$I_f = 4.7 \cdot 807.9841 = \text{kf } 3797.5253$$

De totale investeringen  $I_{\text{tot}}$  worden dan volgens vergelijking (88):

$$1.25 \cdot I_f = \text{kf } 4746.9066$$

### 8.4.2 Methode van Taylor

Bij de methode van Taylor wordt het proces opgedeeld in een aantal stappen (zie figuur 5). Voor de stappen worden de scores ( $s_i$ ) bepaald. Aan de hand van deze scores kan een "cost lines index" ( $f$ ) berekend worden, met de volgende vergelijking:

$$f = \sum 1,3^{s_i} \quad (91)$$

Gebruikmakend van deze  $f$ -waarde kunnen de totale investeringskosten berekend worden, volgens:

$$I^*_{tot} = 93 f * P^{0.39} * \frac{C_i}{300} \quad (92)$$

In de vergelijkingen (91) en (92) betekenen de symbolen het volgende:

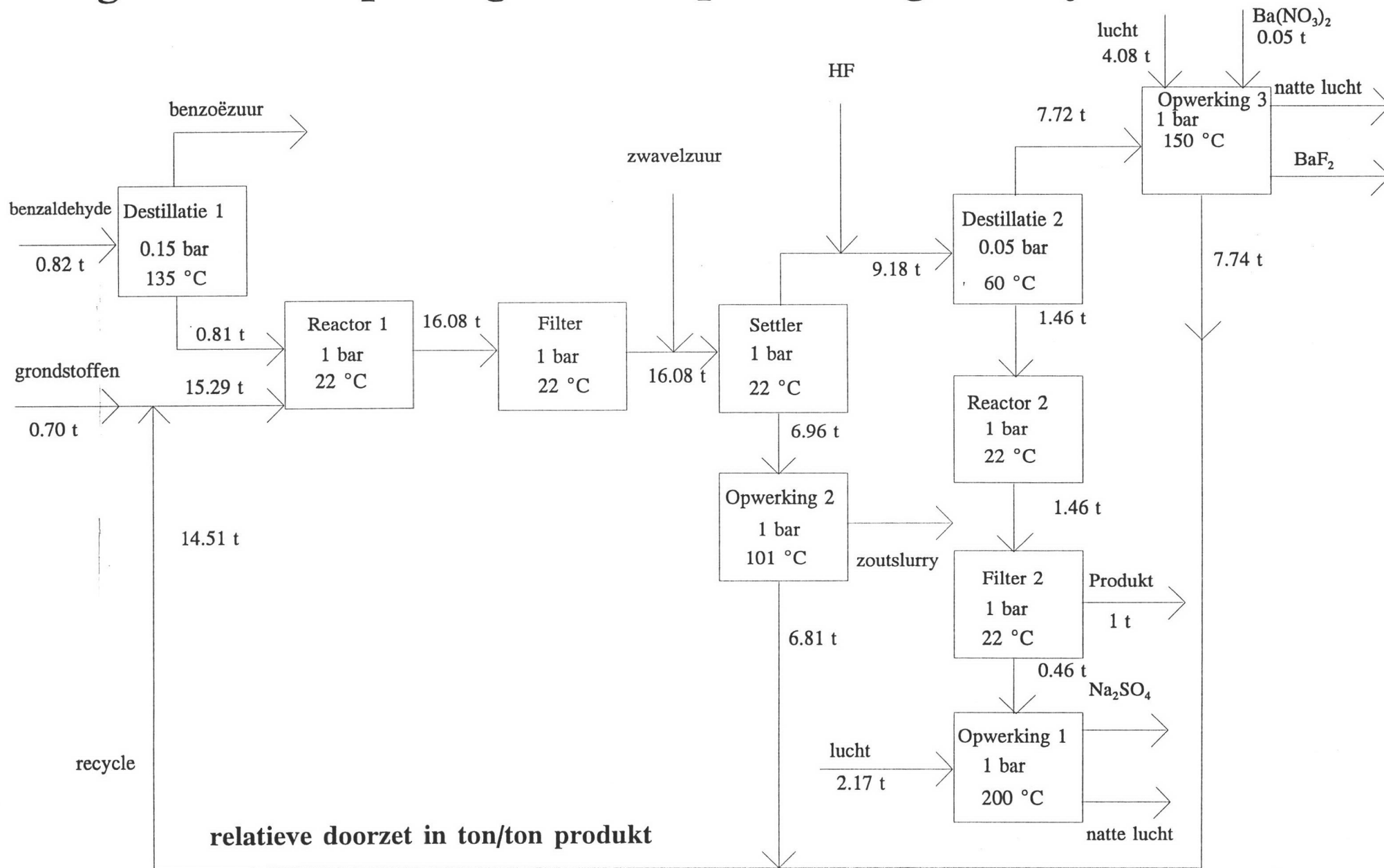
$f$	: cost lines index	[ - ]
$s_i$	: score	[ - ]
$p$	: capaciteit	[kton/jaar]
$I^*_{tot}$	: totale investeringskosten	[k\$]
$C_i$	: cost index (=790 in 1990)	[ - ]

De score  $s_i$  wordt bepaald door de relatieve doorzet, de druk, de temperatuur en de materiaalkeuze van het apparaat. Deze waarden staan vermeld in tabel 49. Voor  $f$  wordt dan, door toepassing van vergelijking (91), de waarde 42.44 gevonden. Het investeringsbedrag voor de bouw komt dan, volgens vergelijking (92), op 4266.957 kdollar, wat overeenkomt met  $k_f$  7040.4791.

Tab 49: Scores van de verschillende stappen volgens de methode van Taylor

Stap	Relatieve doorzet	Score doorzet	Score druk/temp	Score materiaal	Totaal score	f
Destillatie 1	0.82	-0.45	1	1	1.55	1.50
Reactie 1	16.08	5.20	0	1	6.2	5.09
Filter 1	16.08	5.20	0	1	6.2	5.09
Flash	16.08	5.20	0	1	6.2	5.09
Destillatie 2	9.18	4.15	2	1	7.15	6.53
Reactie 2	1.46	0.80	0	1	1.8	1.60
Filter 2	1.46	0.80	0	1	1.8	1.60
Opwerking 1	2.63	1.80	0.40	1	3.2	2.32
Opwerking 2	6.96	3.65	0.20	1	4.85	3.57
Opwerking 3	11.85	4.60	0.30	1	5.90	4.70
Totaal						42.44

# Figuur 5: De opdeling van het proces volgens Taylor



go

De enzymatische Productie van mandelonitril

FV0 3186

## 8.5 De totale kosten, $K_T$

In de totale kosten worden de totale investeringskosten opgenomen die zijn bepaald volgens de methode van Lang .

Vergelijking (86) levert:

$$\begin{aligned} K_T &= 1.13 \cdot K_P + 2.6 \cdot K_L + 0.13 \cdot I_{\text{tot}} \\ &= 1.13 \cdot 5031.9617 + 2.6 \cdot 456.4510 + 0.13 \cdot 4746.9066 \\ &= 7489.9872 \text{ (kf /jaar)} \end{aligned}$$

## 8.6 Aflossing Afschrijving en rente

Er wordt een lineair model gebruikt voor het berekenen van de afschrijvingen:

$$R_f = \frac{I_{\text{tot}} - I_w}{n} \quad (93)$$

Hierin geldt:  $R_f$  : de afschrijvingen per jaar [kf]  
 $n$  : de afschrijvingsperiode van 10 jaar. [jaar]

De afschrijvingen,  $R_f$ , bedragen jaarlijks kf 446.2092.

In het lineaire afschrijvingsmodel wordt geen rekening gehouden met de veranderende rentelasten over de periode van afschrijving. Uitgaande van een rentevoet van 8% over een afschrijvingsperiode van 10 jaar en gebaseerd op 60% van de totale investeringen, worden de rentekosten berekend met de volgende vergelijking:

$$\text{Rentekosten} = 0.6 \cdot \text{Rentevoet} \cdot I_{\text{tot}} \quad (94)$$

De rentekosten bedragen kf 227.8515.

## 8.7 Economische criteria

### 8.7.1 Inkomsten en "cash flow"

De inkomsten uit de bedrijfsvoering bestaan uit de verkoop van mandelonitril en BaF<sub>2</sub>. De verkoopprijs voor mandelonitril is f 100000.00/ton en voor BaF<sub>2</sub> f 7640.00/ton. Een jaarproductie van 102.6 ton mandelonitril en 1180.03 ton BaF<sub>2</sub> resulteert in een inkomstenbron van kf 11439.8978/jaar.

Tabel 50: "cash flow" berekening

kostengroep	kf/ jaar
Inkomsten	11439.8978
Totale kosten , K <sub>p</sub>	-5031.9617
Afschrijving	-446.2092
Rentekosten	-227.8515
Semi-variabele kosten , K <sub>L</sub>	-456.4510
Bruto winst	5277.4244
Belasting 50%	-2638.7122
Netto winst	2638.7122
Afschrijving	+446.2092
Cash flow	3084.9214

*Aflossing.*

In het eerste jaar bedraagt de cash flow kf -4082.3397 (I<sub>r</sub>+I<sub>w</sub>), en in het elfde jaar kf 3369.7358 (cash flow/jaar +I<sub>r</sub>).

### 8.7.2 "Return On Investment", ROI

De "return on investment" kan volgens onderstaande vergelijking worden bepaald:

$$ROI = \frac{W}{I_f + I_w} * 100 \% \quad (95)$$

met: W : de netto winst [kf]

De ROI is in dit proces gelijk aan 64.64%.

### 8.7.3 "Internal Rate of Return", IRR

De "internal rate of return" kan uitgerekend worden met de volgende vergelijking :

$$\sum_{i=0}^{11} C_{fi} * D_i = 0 \quad (96)$$

Hierin geldt :  $C_{fi}$  : jaarlijkse "cash flow " [kf]  
 $D_i$  : "discount factor" [-]

De factor  $D_i$  in deze vergelijking is:

$$D_i = \frac{1}{(1+IRR)^n} \quad (97)$$

Tabel 51: jaarlijkse "cash flow"

Jaar	$C_f$ (kf)
1	- 4082.3397
2-10	3084.9214
11	3369.7358

Uit vergelijkingen (96) en (97) volgt dan dat de IRR 75.31% is.

### 8.7.4 "Pay Out Time", POT

De pay out time is het minimaal aantal jaren dat nodig is om het initiële geïnvesteerde kapitaal minus het werkkapitaal terug te verdienen.

De "pay out time" kan berekend worden met:

$$POT = \frac{I_{tot} - I_W}{E_o} \quad (98)$$

Hierin geldt:  $E_o$  : (inkomsten-(a\*K<sub>p</sub>+b\*K<sub>L</sub>)), "de exploration carry over" parameter.

In dit proces is de "pay out time" gelijk aan 0.9770 jaar.



## 9 Conclusie en aanbevelingen

### 9.1 Conclusie

Het procesvoorstel voor de enzymatische produktie van R-mandelonitril heeft geleid tot het ontwerp van een twee-fase continu proces dat in staat is een productiecapaciteit van 102.6 ton per jaar met een zuiverheid en een ee-waarde van respectievelijk 98.2% en 0.98 te realiseren.

Het ontwerp van de opwerkingsprocedure heeft naast de hoofdproductstroom een tweede produktstroom van zuiver bariumfluoride opgeleverd met een jaarproduktie van 154.5 ton. Dit brengt een extra inkomstenbron met zich mee.

De investeringskosten zijn bepaald volgens de 'Taylor-methode' en de 'Lang-methode'. Via de eerste methode komt de investeringskosten op kf 7040.4791, de tweede methode levert een waarde van kf 4746.9066. In de netto winst zijn de investeringskosten die gebaseerd zijn op de 'Lang-methode' in rekening gebracht. Deze bedraagt, uitgaande van een afschrijving over tien jaar, drie miljoen gulden per jaar. De "Return Of Investment" en de "Pay Out Time" bedragen respectievelijk 64.64% en 0.977 jaar.

De doelstelling om een technisch en economisch haalbaar procesontwerp te ontwikkelen waarbij wordt voldaan aan alle gestelde eisen is hierbij bereikt.

### 9.2 Aanbevelingen

In hoeverre de simulatie van het procesontwerp representatief is voor de werkelijkheid hangt voornamelijk af van de beperkingen die worden opgelegd door het simulatieprogramma Chemcad. Met name de verdeling van de verschillende componenten over de organische en de waterige fase zou experimenteel geverifieerd moeten worden. In de praktijk zou de verdeling van de verschillende componenten over de beide fasen veel gunstiger voor de latere opwerkingsprocedure kunnen uitpakken. Dit zou kunnen resulteren in een hogere produktzuiverheid.

Ook de mate waarin auto-oxidatie van benzaldehyde tot benzoëzuur in de enzymreactor plaats vindt moet worden nagegaan. Indien auto-oxidatie niet of nauwelijks optreedt zal dit wederom resulteren in een hogere produktzuiverheid.

Zoals reeds vermeld in de omschrijving van de processtructuur is er rekening mee gehouden dat er ijsafzetting op zou kunnen treden bij de condensatie van de topstroom van de mandelonitrilkolom. Het is in principe denkbaar dat dit in de praktijk niet voor komt. In dat geval zou de toevoeging en de latere verwijdering van waterstoffluoride overbodig zijn. De extra kosten die gerelateerd zijn aan het gebruik van waterstoffluoride in het proces werden overigens wel ruimschoots gecompenseerd door de produktie van het winstgevendende bariumfluoride.

In de ontwateringsreactor is gebruik gemaakt van een overmaat aan natriumsulfaat waarbij is aangenomen dat een verblijftijd van 5 uur voldoende zou zijn om 99% van het aanwezige water te verwijderen. De toe te voegen hoeveelheid natriumsulfaat en de verblijftijd in de ontwateringsreactor kunnen verder geoptimaliseerd worden indien de exacte kinetiek van deze reactie wordt achterhaald.

Bij het opvangen van waterstoffluoride in de  $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$  -reactor is aangenomen dat de contacttijd van de gasbellen lang genoeg zal zijn om alle waterstoffluoride naar de vloeistoffase te laten diffunderen. De benodigde contacttijd zal afhankelijk zijn van de grootte van de ingevoerde gasbellen en de diffusiesnelheid. Ook hier zal experimentele verificatie een vereiste zijn.

Een continu proces komt beter tot zijn recht bij een hogere productiecapaciteit (ca. 500 ton/jaar). Indien de afzetmarkt het toelaat kan opschaling van het proces zeker aanbevolen worden.

## 10 Symbolenlijst

### Hoofdstuk 3

$\Delta T$	vriespuntsdaling	[°C]
$m_c$	molariteit toegevoegde component	[mol/l]
$k_f$	cryoscopische constante	[k*/mol]

### Hoofdstuk 4

#### 4.1 Ontwerp van de enzymreactor

$2F_{RM,uit}$	flow van R-mandelonitril uit de reactor	[mol/s]
$F_{SM,uit}$	flow van S-mandelonitril uit de reactor	[mol/s]
$v_1$	snelheid van de enzymatische synthese	[mol/l*s]
$v_2$	snelheid van de enzymatische splitsing	[mol/l*s]
$v_3$	reactiesnelheid van de chemische synthese van R/S-mandelonitril	[mol/l*s]
$v_4$	reactiesnelheid van de chemische ontleding van R-mandelonitril	[mol/l*s]
$v_5$	reactiesnelheid van de chemische ontleding van S-mandelonitril	[mol/l*s]
$V_{aq}$	volume van de waterige fase	[l]
[RM]	concentratie R-mandelonitril in de waterige fase	[mol/l]
[SM]	concentratie S-mandelonitril in de waterige fase	[mol/l]
$V_{max}^{AB}$	maximale reactiesnelheid van de synthese	[mol/l*s]
[E]	enzymconcentratie	[l/l]
[A]	concentratie benzaldehyde in de waterige fase	[mol/l]
[B]	concentratie waterstofcyanide in de waterige fase	[mol/l]
$K_m^A$	Michaelis-menten-constante voor benzaldehyde	[mol/l]
$K_m^B$	Michaelis-menten-constante voor waterstofcyanide	[mol/l]
$K_i^M$	inhibitieconstante voor mandelonitril	[mol/l]
$V_{max}^M$	maximale reactiesnelheid van de splitsing	[mol/l*s]
$K_m^M$	Michaelis-menten-constante voor mandelonitril	[mol/l]
$K_i^A$	inhibitieconstante voor benzaldehyde	[mol/l]
$K_i^B$	inhibitieconstante voor waterstofcyanide	[mol/l]
$k_2$	snelheidsconstante voor de chemische synthese	[l/mol*s]
$k_3$	snelheidsconstante voor de chemische splitsing	[l/s]
$C_E$	enzymconcentratie	[g/l]
$H_v$	hoogte reactor	[m]
$T_v$	diameter reactor	[m]
D	diameter roerder	[m]
$H_s$	hoogte roerder	[m]
$t_m$	mengtijd	[s]
N	toerental	[s <sup>-1</sup> ]

$N_p$	powernumber	[-]
Re	Reynoldsgetal	[-]
$\rho$	dichtheid medium	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\eta$	viscositeit medium	[Pa*s]
$P_s$	vermogen van de roerder	[W]
$\Gamma_{HS}$	warmteproductie door de roeder	[W]
$\Gamma_{HW}$	warmteoverdracht van vloeistof naar de wand	[W]
$h_w$	warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> *K]
$A_f$	totaal wandoppervlak van de reactor	[m <sup>2</sup> ]
T	mediumtemperatuur	[°C]
$T_l$	buitenlucht temperatuur	[°C]
$A_c$	koeloppervlak	[m <sup>2</sup> ]
$h_t$	totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> *K]
h	warmteoverdrachtscoëfficiënt van het medium	[W/m <sup>2</sup> *K]
$d_w$	dikte van de reactorwand	[m]
$\lambda_w$	warmte geleidbaarheid van de reactorwand	[W/m <sup>2</sup> *K]
$C_p$	specifieke warmte van het medium	[J/kg*°C]
$C_{pc}$	specifieke warmte van het koelwater	[J/kg*°C]
$T_{CO}$	temperatuur uitgaande koelwater	[°C]
$T_{CI}$	temperatuur ingaande koelwater	[°C]
$H_c$	netto geproduceerde warmte	[W]
$\Phi_{mc}$	massadebiet van het koelwater	[kg/s]
$\frac{[HNC]}{[HNC]} / \frac{[HNC]}{[HNC]}$	concentraties gedeprotoneerd citroenzuur	[mol/l]
$[HCN]/[CN^-]$	concentraties gedeprotoneerd waterstofcyanide	[mol/l]
$[BH]/[B^-]$	concentraties gedeprotoneerd benzoëzuur	[mol/l]
$[H^+]$	proton concentratie op basis van enkel de zuurbijdrage	[mol/l]
$[Citr]_{tot}$	totaal concentraties citroenzuur	[mol/l]
$[Benzo]_{tot}$	totaal concentratie benzoëzuur	[mol/l]
$[HCN]_{tot}$	totaal concentratie waterstofcyanide	[mol/l]
$[OH^-]$	hydroxide concentratie op basis van de opgeloste hoeveelheid natriumhydroxide	[mol/l]
$[H^+]_{tot}$	netto proton concentratie	[mol/l]
PH	zuurtegraad	[-]
$K_a$	dissociatieconstante	[mol/l]
$\tau_{so}$	karacteristieke tijd voor de stofoverdracht	[-]
$k_L$	stofoverdrachtscoëfficiënt aan de zijde van de continue(organische) fase	[m/s]
A	specifiek oppervlak van de gedispergeerde (waterige) fase	[m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup> ]
$\rho_c$	dichtheid van de continue (organische) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]
$D_m$	diffusiecoëfficiënt	[m <sup>2</sup> /s]
$\eta_c$	viscositeit van de continue (organische) fase	[Pa*s]
$\eta'$	viscositeit van de continue (waterige) fase	[Pa*s]
$d_d$	druppelgrootte van de gedispergeerde (waterige) fase	[m]
$f_v$	volume fractie van de gedispergeerde (waterige) fase	[-]
$\sigma$	tussenfase spanning	[N/m]
$\tau_c$	karacteristieke tijd voor de enzymatische omzetting van benzaldehyde	[-]
$C_{banz}$	concentratie benzaldehyde in de waterige fase	[mol/L]
$\Gamma_{benz}$	omzettingssnelheid van benzaldehyde	[mol/L*s]

4.2 *Ontwerp van de settler*

$u_d$	settling snelheid van de gedispergeerde fase	[m/s]
$d_d$	druppel diameter	[m]
$\mu_c$	viscositeit van de continue fase	[N*s/m <sup>2</sup> ]
$g$	gravitatie versnelling, 9.81	[m/s <sup>2</sup> ]
$\rho_d$	dichtheid disperse (waterige) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho_c$	dichtheid continue (organische) fase	[kg/m <sup>3</sup> ]
$u_c$	instroom snelheid van de continue fase	[m/s]
$L_c$	volume debiet continue fase	[m <sup>3</sup> /s]
$A_i$	interface oppervlak	[m <sup>2</sup> ]
$D_s$	diameter van de settler	[m]
$H_s$	hoogte van de settler	[m]
$V_s$	volume van de settler	[m <sup>3</sup> ]
$B$	dikte van dispersieband	[m]
$\tau_d$	verblijftijd van de druppels in de dispersieband	[s]
$z_1$	organische fase afvoerhoogte	[m]
$z_2$	waterige fase afvoerhoogte	[m]
$z_3$	interface hoogte	[m]
$[H^+]_{H_2SO_4}$	proton concentratie in de waterige fase afkomstig van toegevoegd zwavelzuur	[mol/l]

4.4 *Ontwerp van de Ba(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>-reactor*

$K$	Henryconstante	[bar]
$P_{HCN}$	partiaaldruk van HCN in de gasfase	[bar]
$x_{HCN}$	molfractie HCN in de oplossing	[-]
$P_{sg}$	roerder vermogen onder gasbelasting	[W]
$P_{so}$	onbegast roerder vermogen	[W]
$F_g$	gas volumedebiet	[m <sup>3</sup> /s]
$V_l$	vloeistofvolume	[m <sup>3</sup> ]

4.9 *Ontwerp van de verdamper*

$\Phi_w$	warmte capaciteit	[kW]
$U$	overall warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> /°C]
$A$	buiten oppervlakte van de tubes	[m <sup>2</sup> ]
$\Delta T_m$	het gemiddelde temperatuurverschil	[°C]
$T_1$	verzadigde temperatuur van stoom bij 1.7 bar	[°C]
$T_2$	temperatuur van proces stroom	[°C]
$d_0$	de buiten diameter van een tube	[m]
$L$	de lengte van een tube	[m]
$D_b$	de bundeldiameter	[m]
$d_0$	buiten diameter van de tubes	[m]
$N_t$	het aantal tubes	[-]
$K_{1,n_1}$	twee constanten die afhankelijk zijn van de pitch, het aantal passages en de afstand tussen de tubes	[-]

$D_s$	de diameter van de shell	[m]
$m$	de hoeveelheid stoom die is er nodig	[kg/h]
$\Delta H$	het verdampingswarmte van stoom	[kJ/kg]

4.10 *Ontwerp van de destillatietorens*

$H_{\text{schotelsectie}}$	de hoogte van de schotelsectie	[m]
$N$	het aantal schotels	[-]
$E_0$	het overall schotelrendement	[-]
$H_{\text{kolom}}$	de hoogte van de kolom	[m]
$A_r$	het oppervlakte van de kolom	[m <sup>2</sup> ]
$\phi_v$	flow door de kolom	[m <sup>3</sup> /s]
$F$	constante, een waarde van 1.5	[-]
$\rho_g$	dichtheid van het gas	[kg/m <sup>3</sup> ]
$D_t$	de diameter van de kolom	[m]

4.11 *Ontwerp van de zeoliet kolommen*

$M_w$	de hoeveelheid water die moet worden weggehaald	[kg]
$\Phi_m$	water massa debiet van de proces stroom	[kg/h]
$t$	operatie tijd	[h]
$M_Z$	de hoeveelheid zeoliet 4A die moet worden gebruikt	[kg]
$C_w$	water capaciteit van de zeoliet 4A	[-]
$V_p$	de pakingsinhoud van de kolom	[m <sup>3</sup> ]
$\rho_Z$	dichtheid van droge zeoliet 4A	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\varepsilon$	porositeit van de gepakt bed	[-]
$D$	de diameter van de kolom	[m]
$H$	de kolomhoogte	[m]
$M_l$	de hoeveelheid lucht die moet worden gebruik	[kg]
$H_{l1}$	ingående vochtgehalte van lucht	[kg/kg]
$H_{l2}$	uitgaande vochtgehalte van lucht	[kg/kg]

4.12 *Ontwerp van de drogers*

$V$	volume van de droger	[m <sup>3</sup> ]
$P_v$	verdampingsvermogen van de droger	[kg/s]
$P_c$	verdampingscapaciteit van de droger	[kg/m <sup>3</sup> s]
$D$	diameter van de droger	[m]
$L$	lengte van de droger	[m]
$P$	roteringsvermogen van de droger	[kW]
$T_R$	referentie temperatuur	[K]
$T_{\text{natte massa,in}}$	temperatuur van ingaande natte massa	[K]
$T_{\text{droge massa,uit}}$	temperatuur van uitgaande droge massa	[K]
$T_{\text{lucht,in}}$	temperatuur van ingaande lucht	[K]
$T_{\text{lucht,uit}}$	temperatuur van uitgaande lucht	[K]
$T_{\text{vap,water}}$	verdampingstemperatuur van water	[K]

$\Delta H_{\text{vap(water bij 373 K)}}$	verdampingsenthalpie van water bij 373 K	[K]
$C_{p,\text{zout}}$	warmtecapaciteit van het zout	[kJ/kgK]
$C_{p,\text{droge lucht}}$	warmtecapaciteit van droge lucht	[kJ/kgK]
$C_{p,\text{water}}$	warmtecapaciteit van water	[kJ/kgK]
$C_{p,\text{waterdamp}}$	warmtecapaciteit van waterdamp	[kJ/kgK]
$Y$	luchtvochtigheid	[kg/kg]
$Q_{\text{lucht,in}}$	energiestroom van ingaande lucht	[kJ/s]
$Q_{\text{lucht,uit}}$	energiestroom van uitgaande lucht	[kJ/s]
$Q_{\text{natte massa,in}}$	energiestroom van ingaande natte massa	[kJ/s]
$Q_{\text{droge massa,uit}}$	energiestroom van uitgaande droge massa	[kJ/s]
$m_{\text{in}}$	ingaande luchtstroom	[kg/s]
$m_{\text{uit}}$	uitgaande luchtstroom	[kg/s]
$m_1$	ingaande vloeistofstroom uit de natte massa	[kg/s]
$m_s$	ingaande droge massastroom	[kg/s]

#### 4.13 Ontwerp van de warmtewisselaars

$Q$	warmtecapaciteit	[W]
$\phi_{m,\text{koelw}}$	massastroom koelwater	[kg/s]
$C_{p,\text{koelw}}$	warmtecapaciteit van koelwater	[J/kg C]
$\Delta T_{\text{koelw}}$	$T_2 - T_1$	[°C]
$U$	totale warmteoverdrachtscoëfficiënt	[W/m <sup>2</sup> C]
$A$	warmtewisselend oppervlak	[m <sup>2</sup> ]
$\Delta T_m$	gemiddelde temperatuurverschil	[°C]
$T_1$	ingaande temperatuur mantelzijde	[°C]
$T_2$	uitgaande temperatuur mantelzijde	[°C]
$t_1$	ingaande temperatuur buiszijde	[°C]
$t_2$	uitgaande temperatuur buiszijde	[°C]
$F_t$	correctiefactor	[-]
$R$	$(T_1 - T_2)/(t_2 - t_1)$	[-]
$S$	$(t_2 - t_1)/(T_1 - t_1)$	[-]
$N_t$	aantal buizen	[-]
$A_b$	oppervlakte van een buis	[m <sup>2</sup> ]
$L$	lengte van een buis	[m]
$d_o$	buitendiameter van de buis	[m]

#### 4.14 Ontwerp van de pompen

$\phi_v$	volumestroom	[m <sup>3</sup> /s]
$\Delta p$	drukverschil	[Pa]
$\eta$	rendement van de pomp	[-]

**Hoofdstuk 5**

$\Delta H$	energie	[kJ/sec]
$\phi_m$	massa stroom	[kg/sec]
$C_p$	warmte capaciteit	[kJ/kmol*K]
$\Delta T$	temperatuurverschil	[K]
$\Delta H_{VAP}$	verdampingsenthalpie	[kJ/kg]
$\Delta H_{form}$	vormingsenthalpie	[kJ/kg]

**Hoofdstuk 8**

$C_e$	aanschafprijs	[kf]
$C_f$	cash flow	[kf]
$C_i$	cost index	[-]
$D_i$	discout factor	[-]
$E_o$	exploration carry over	[kf]
$f$	costline index	[-]
$f_l$	Lang factor	[-]
$I_{tot}$	totale investeringen	[kf]
$I_{tot}^*$	totale investeringen	[k\$]
$I_B$	investerigen in de proceseenheden inclusief de indirecte bouwkosten	[kf]
$I_H$	investerigen in de hulpapparatuur, de off-site investerigen en de indirecte kosten daarvan	[kf]
$I_L$	investerigen in niet tastbare zaken	[kf]
$I_w$	werkkapitaal, voorraden, cash etc.	[kf]
$I_f$	fixed capital	[kf]
$I_a$	totale apparaatuurkosten	[kf]
IRR	Internal Rate of Return	[%]
$K_T$	totale kosten	[kf]
$K_A$	algemene kosten	[kf]
$K_o$	indirecte fabricage kosten	[kf]
$K_p$	produktie-volume afhankelijke kosten	[kf]
$K_L$	semi-variabele kosten	[kf]
$n$	index voor het betreffende apparaat	[-]
$n^*$	afschrijvingsperiode	[jaar]
$p$	capaciteit	[kton/jaar]
POT	Pay Out Time	[jaar]
ROI	Return On Investment	[%]
$R_f$	afschrijving per jaar	[kf]
$S$	karakteristieke afmeting van het apparaat in SI unit	[-]
$S_i$	score	[-]
$W$	netto winst	[kf]
$x$	omrekeningskoers van £ naar f	[-]



---

## 11 Literatuurlijst

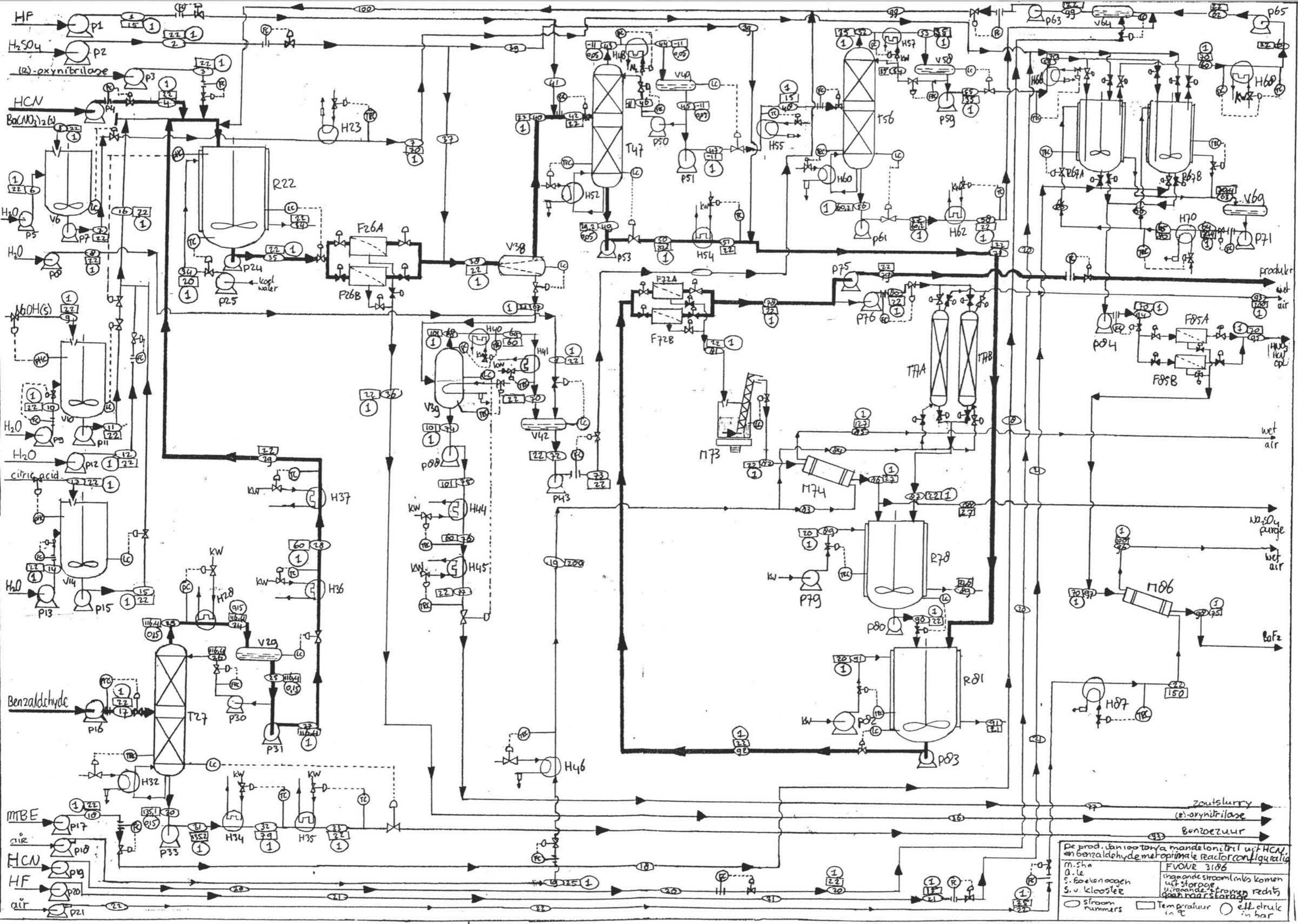
- 1 Coulson & Richardson's, chemical Engineering, vol.6 (1993).
- 2 James M. Douglas, Conceptual design of chemical processes (1988).
- 3 Prof.ir.J.Grievink, drs.F.A.Meijer en A.van den Ham, Handleiding voor het maken van een fabrieksvoorontwerp (1993).
- 4 Handbook of chemistry and physics, 75<sup>th</sup> edition.
- 5 Chemiekaarten, 7<sup>th</sup> editie (1991).
- 6 De Graauw, J., Paijens, A. (1994), Pompen en Compressoren, Delft :TU Delft, Lab. Apparatenbouw Procesindustrie.
- 7 Prof.ir.A.G. Montfoort, De chemische fabriek, deel II, TUDelft, 1991.
- 8 Prof.dr.B.H. Bibo, dr. ir. S.M. Lemkowitz, Chemical risk management, Delft (1994).
- 9 DACE-Prijzenboekje (1994), 17<sup>e</sup> editie, Leidschendam: Dutch Association of cost Engineers.
- 10 Klaas van 't Riet, Johannes Tramper, Basic Bioreactor Design (1991).
- 11 O.S.L Bruinsma, Selectie van apparaten en Thermodynamica en kinetiek van het droogproces, Laboratorium Apparatenbouw Procesindustrie, Delft (1991).
- 12 Applied Microbiology Biotechnology (1988), Activity and operational stability of immobilized mandelonitrile lyase in methanol/water mixtures.
- 13 Udo Kragl, Reaktionentechnische untersuchungen zur enzymkatalysierten cyanhydrinsynthese, Januar 1988.
- 14 C.G.Kruse, Chiral Cyanohydrins - Their Manufacture and Utility as Chiral Building Blocks (1992).
- 15 W.T.Loos, H.W. Geluk and C.G. Kruse, Synthesis of optically active cyanohydrins using R-oxynitrilase in a liquid-liquid biphasic system (1995).
- 16 Engineering Aspects of Enzyme Engineering (1990), Continuous Asymmetric C-C Bond Formation in an Enzyme-Membrane-Reactor.

- 
- 17 Smith & Van Ness, Introduction To Chemical Engineering Thermodynamics, Fourth Edition.
  - 18 P.W Atkins, Physical Chemistry, Fourth Edition (1990)
  - 19 Holtzclaw, Henry F. / Robinson, William R. / Odom, Jerome D., General Chemistry, Ninth Edition (1991).
  - 20 Janssen & Warmoeskerken, transport phenomena data companion, Second Edition (1991)
  - 21 Robert H. Perry, Don Green, Perry's Chemical Engineers Handbook, sixth edition, Mc Graw-Hill international editions
  - 22 Lewis, Richard j. Sr., Sax's dangerous properties of industrial materials, volume 1, 2 en 3, 8th edition (1992)
  - 23 Lewis, Richard j. Sr., Sax's dangerous properties of industrial materials, update 1993, 8th edition
  - 24 D. W. Breck, Zeolite molecular sieves, structure, chemistry and use, gepubliceerd door J. wiley & Sons Inc., 1974

---

## 12 Bijlagen

NR	Omschrijving
1	Procesflowsheet
2 <sup>A-B</sup>	Betekenis apparaatnummers in procesflowsheet
3 <sup>A-F</sup>	Lijst van componenten
4 <sup>A-T</sup>	Stroom/componentenstaat
5 <sup>A-C</sup>	Warmtebalans van het gehele proces
6 <sup>A-I</sup>	Massa- en warmtebalans bij procesflowschema
7 <sup>A-J</sup>	Specificatielijst van pompen
8 <sup>A-C</sup>	Specificatieformulier torens
9	Specificatielijst voor vaten
10	Specificatielijst voor verdamper
11	Specificatielijst voor zeolietkolommen
12	Specificatielijst voor reactoren en mengers
13	Specificatielijst voor mengvaten
14	Specificatietabellen zoutopvangvat en transportschroef
15	Specificatielijst filters
16	Specificatielijst settler
17 <sup>A-F</sup>	Specificatielijst warmtewisselaars



De prod. van 100 ton/yr mandelonitril uit HCN, en benzaldehyde met optimale reactor configuratie.

m. sha  
 0. le  
 S. Boekenlaan  
 S.v. Klooster

FVOUR 3106  
 Ingaande stroomlijns komen uit storage  
 Aan de stroom rechts daar naar storage

□ stroomnummers  
 □ Temperatuur in °C  
 ○ eff. druk in bar

**Bijlage 2A****Betekenis apparaatnummers  
in procesflowsheet**

Apparaat nr.	Betekenis	Apparaat nr.	Betekenis
P1	Centrifugaalpompe HF	P24	Centrifugaalpompe reactoreffluent
P2	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	P25	Centrifugaalpompe koelwater
P3	Centrifugaalpompe enzym	F26A/B	Wisselfilter voor het enzym
P4	Centrifugaalpompe HCN	T27	Benzaldehydekolom (over top)
P5	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> O	H28	Topcondensator (benzaldehyde)
V6	Mengvat Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -opl.	V29	Topaccumulator (benzaldehyde)
P7	Centrifugaalpompe Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -opl.	P30	Centrifugaalpompe (reflux benzaldehyde)
P8	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> O	P31	Centrifugaalpompe benzaldehyde
P9	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> O	H32	Reboiler (benzaldehyde)
V10	Mengvat NaOH-opl.	P33	Centrifugaalpompe Benzoëzuur
P11	Centrifugaalpompe NaOH-opl.	H34	Koeler benzoëzuur
P12	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> O	H35	Koeler benzoëzuur
P13	Centrifugaalpompe H <sub>2</sub> O	H36	Koeler benzaldehyde
V14	Mengvat citroenzuur-opl.	H37	Koeler benzaldehyde
P15	Centrifugaalpompe citroenzuur-opl.	V38	Settler
P16	Centrifugaalpompe benzaldehyde	V39	Verdamper
P17	Centrifugaalpompe MTBE	H40	Condensator (waterrecycle)
P18	Blower lucht	H41	Koeler (waterrecycle)
P19	Centrifugaalpompe HCN	V42	Regelvat water
P20	Centrifugaalpompe HF	P43	Centrifugaalpompe water
P21	Blowe lucht	H44	Koeler zoutslurry
R22	Enzymreactor	H45	Koeler zoutslurry
H23	Heater Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -opl.	H46	Heater lucht

## Bijlage 2B Betekenis apparaatnummers in procesflowsheet

Apparaat nr.	Betekenis	Apparaat nr.	Betekenis
T47	mandelonitril kolom (HF en HCN over top mandelonitril over de bodem)	H68	Condensor HCN-recycle stroom
H48	Topcondensor HF/HCN	V69	Koelwatervat
V49	Topaccumulator HF/HCN	H70	Heater koelwater R67
P50	Centrifugaalpompe reflux HF/HCN	P71	Centrifugaalpompe koelwater
P51	Centrifugaalpompe HF/HCN	F72A/B	Wisselfilter voor $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
H52	Reboiler mandelonitril	M73	zoutopvangvat+transportschroef
P53	Centrifugaalpompe mandelonitril	M74	Droger voor $\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$
H54	Koeler mandelonitril	P75	Centrifugaalpompe mandelonitril
H55	Heater HF/HCN	P76	Centrifugaalpompe mandelonitril-recycle
T56	HF kolom (HF over top)	T77A/B	Zeoliet toren-systeem ( $\text{H}_2\text{O}$ weg)
H57	Topcondensor HF	R78	slurrymenger
V58	Topaccumulator HF	P79	Centrifugaalpompe koelwater
P59	Centrifugaalpompe HF	P80	slurrypompe (piston)
H60	Reboiler MTBE	R81	ontwateringsreactor
P61	Centrifugaalpompe MTBE	P82	Centrifugaalpompe koelwater
H62	Koeler MTBE	P83	Slurrypompe (piston)
P63	Centrifugaalpompe MTBE-recycle	P84	Slurrypompe (piston) ( $\text{BaF}_2$ -opl)
V64	Regelvat MTBE	F85A/B	Wisselfilter voor $\text{BaF}_2$
P65	Centrifugaalpompe HCN-recycle	M86	Droger voor nat $\text{BaF}_2$
H66	Heater HF	H87	Heater lucht
R67A/B	$\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ -reactor	P88	Slurrypompe (piston) (zoutslurry)



## Bijlage 3B

## Lijst van componenten

stof nr.	component	structuur formule	M (g/mol)	T <sub>k</sub> (°C)	T <sub>sp</sub> (°C)	ρ (kg/m <sup>3</sup> )	MAC (mg/m <sup>3</sup> )	LD (mg/kg)
8	mandelo-nitril	C <sub>8</sub> H <sub>7</sub> NO	133.2	170	-10	1100	30* <sup>1</sup>	NG
9	koelwater	H <sub>2</sub> O	18	100	0	996	NVT	NVT
10	proceswater	H <sub>2</sub> O	18	100	0	996	NVT	NVT
11	Zwavelzuur (98%)	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	98.1	290	11	1836	1	*LDLo mens 135mg/kg *oral rat LD50 2140 mg/kg
12	Natrium sulfaat	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	142.1	1700 (>)	884	2700	NV	*oral muis TDLo 14 g/kg *oral muisLD50 5989 mg/kg
13	Waterstof fluoride (73%)	HF	20	20	-83	950	2.5(als F) (3.3 ppm)	*inadem mens LCLo 4980µg/kg *skin muis LDLo 500mg/kg
14	Barium nitraat	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	261.4	ontleed voor 't smelt	590	3240	0.5 (als Ba)	*oral rat LD50 355mg/kg *oral dog LDLo 250mg/kg
15	Barium fluoride	BaF <sub>2</sub>	175.3	2260	1368	4893	---	*oral rat LD50 250mg/kg
16	Salpeter zuur	HNO <sub>3</sub> (65%)	63.0	122	-41.6	1400	5 (2ppm)	*inhalation rat LC50 67ppm (NO <sub>2</sub> /4H)



## Bijlage 3C

## Lijst van componenten

stof nr.	$\eta$ (bij 22°C) (*10 <sup>3</sup> *Pa*sec)	Oplosbaarheid (kg/m <sup>3</sup> )	Samenstelling (%)	Prijs (Fl/ton)
1	0.188	zeer goed in H <sub>2</sub> O	>99.5% HCN <0.5% water	1324.50 (\$/ton)
2	1.405	3.00 (H <sub>2</sub> O 20°C)	>99.5% benzaldehyde <0.5% benzoëzuur	1809.52
3	* <sup>3</sup>	3.00 (H <sub>2</sub> O 20°C)	100% benzoëzuur (in benzaldehyde)	2200.00
4	* <sup>4</sup>	592.0 (H <sub>2</sub> O 20°C)	>99.5% Citroenzuur	3000.00
5	* <sup>4</sup>	1110.0 (H <sub>2</sub> O 25°C)	>99.5% NaOH	1352.38
6	0.345	51.00 (H <sub>2</sub> O 20°C)	>99.5% MTBE <0.5% water	2773.33
7	---	100% in H <sub>2</sub> O	100% R-oxynitrilase	100000.00
8	---	0% in H <sub>2</sub> O	98.194% mandelonitril 0.342% water 1.288% citroenzuur 0.035% benzaldehyde 0.095% benzoëzuur 0.047% zwavelzuur	100000.00
9	1.000	NVT	>99.5% water <0.5% opgeloste metalen	0.10

## Bijlage 3D

## Lijst van componenten

stof nr.	$\eta$ (bij 22° C) (*10 <sup>3</sup> *Pa*sec)	Oplosbaarheid (kg/m <sup>3</sup> )	Samenstelling (%)	Prijs (Fl/ton)
10	1.000	NVT	>99.5% water <0.5% opgeloste metalen	2.50
11	26.600	100% in water	98% H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> 2% water	132.45
12	* <sup>4</sup>	162.0 (H <sub>2</sub> O 20° C)	>99% Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> <2% Ca/Mg zouten en R <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	194.26
13	0.2135(19.6° C)	100% in water	73% HF 27% water	2428.26
14	* <sup>4</sup>	202 (H <sub>2</sub> O 75° C)	>99% Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> <1% Ca,Pb,Fe,Sr	1150
15	* <sup>5</sup>	0% in water	>97% BaF <sub>2</sub> <3% heavy metals	7640
16	* <sup>4</sup>	100% in water	65% HNO <sub>3</sub> 35% H <sub>2</sub> O	204.19

---

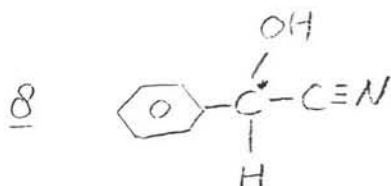
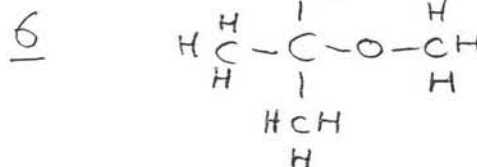
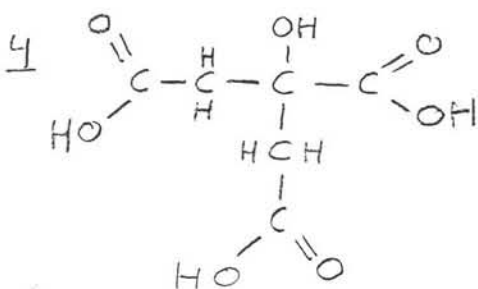
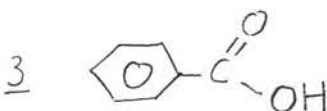
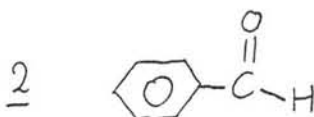
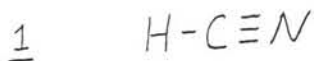
**Bijlage 3E Lijst van componenten\Verklaring bij de tabellen**

- \*<sup>1</sup> De som van de hoeveelheden van benzaldehyde, benzoëzuur en mandelonitril in het afvalwater mag niet hoger zijn dan 30mg/m<sup>3</sup>.
- \*<sup>2</sup> Citroenzuur heeft een ontledingstemperatuur die in de literatuur niet precies bekend is. Ontleding vindt plaats beneden het kookpunt, rond de 200° C
- \*<sup>3</sup> Viscositeit van bezoezuur zal ongeveer gelijk zijn aan die van benzaldehyde aangezien slechts 0.5% benzoëzuur in benzaldehyde is opgelost.
- \*<sup>4</sup> Viscositeit van de stoffen met dit teken is ongeveer gelijk aan water aangezien in het proces waterige oplossingen van deze stoffen worden gebruikt.
- \*<sup>5</sup> De viscositeit van bariumfluoride staat hier niet vermeld aangezien het een vaste stof is in dit proces.
  
- \* Opmerkingen:  
NV: niet vastgesteld  
NG: niet gevonden  
NVT: niet van toepassing

*De prijsgegevens zijn gehaald uit:*

- 1 *FLUKA Chemika-Bio Chemika Analytika, 1995/1996 Nederland*
- 2 *SIGMA Chemie 1996, Biochemische Organische Verbindingen en Diagnostica, Nederland*
- 3 *Chemical prices, Chemical Marketing Reporter, July 4, 1994, blz. 22-30*

## Bijlage 3F

Lijst van componenten  
Schets van de structuurformules

nummers komen overeen met de componentenlijst

**Bijlage 4A**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT NR. :	P1 uit	P2 uit	P3 uit	P4 uit	V6 in
STROOM NR. :	1	2	3	4	5 <sup>*1</sup>
STROOM NAAM :	HF	Zwavelzuur	Enzym	HCN	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide				2.6012	
Proceswater	1.1100	0.0004	0.0100		
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur					
Benzaldehyde					
NaOH					
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur		0.0192			
Waterstoffluoride	3.0000				
R-oxynitilase			0.0007		
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					418.2400
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
<b>Totaal</b>	<b>4.1100</b>	<b>0.0196</b>	<b>0.0107</b>	<b>2.6012</b>	<b>418.2400</b>

\*1 Deze stromen hebben 2,5 uur per 48 uur een waarde, aangezien het vullen van R67 batchgewijs gaat. (zie cyclediagram)

**Bijlage 4B**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr :	P5 uit V6 in	P7 uit R67 in	P8 uit V42 in	V10 in	P9 uit V10 in
STROOM Nr. :	6 <sup>*1</sup>	7 <sup>*1</sup>	8	9	10
STROOM NAAM :	Water	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> -opl	Water	NaOH	Water
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					
Proceswater	2070.4960	2070.4960	*2		0.0241
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur					
Benzaldehyde					
NaOH				0.0268	
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat		418.2400			
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	2070.4960	2488.7360	*2	0.0268	0.0241

\*1 Deze stromen hebben 2,5 uur per 48 uur een waarde, aangezien het vullen van R67 batchgewijs gaat. (zie cyclediagram)

\*2 Dit is een stroom die een regelvat in gaat als het niveau in dit vat daalt, dus is hiervan geen waarde bekend

## Bijlage 4C      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	P11 uit R22 in	P12 uit R22 in	V14 in	P13 uit V14 in	P15 uit R22 in
STROOM Nr. :	11	12	13	14	15
STROOM NAAM :	NaOH-opl.	Water	Citroenzuur	Water	Citroenzuur- opl
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					
Proceswater	0.0241	3.6219		1.5590	1.5590
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur			0.9228		0.9228
Benzaldehyde					
NaOH	0.0268				
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitriase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	0.0509	3.6219	0.9228	1.5590	2.4818

**Bijlage 4D**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	R22 in	P16 uit T27 in	P17 uit V64 in	P18 uit	P19 uit R67 in
STROOM Nr. :	16	17	18	19	20 <sup>1</sup>
STROOM NAAM	Buffer-opl	Benzaldehyd	MTBE	Lucht	HCN
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					3.0800
Proceswater	5.2048			0.3089	
Koelwater					
MTBE			0.0001 <sup>*3</sup>		
Citroenzuur	0.9228				
Benzaldehyde		10.2188			
NaOH	0.0268				
Benzoëzuur		0.0514			
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht				511.2511	
Totaal	6.1544	10.2701	0.0001 <sup>*3</sup>	511.5600	3.0800

Deze stromen hebben 2,5 uur per 48 uur een waarde, aangezien het vullen van R67 batchgewijs gaat. (zie cyclediagram)

\*<sup>3</sup> Dit is een stroom die een regelvat in gaat als het niveau in dit vat daalt, dus is hiervan geen exacte waarde bekend. Er gaat wel al een continue stroom van 0.0001kg/hr in.



**Bijlage 4E**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	P20 uit R67 in 21 <sup>*4</sup> HF	P21 uit H87 in 22 <sup>*5</sup> Lucht	T27 uit H28 in 23 Topstroom destillatie	H28 uit V29 in 24 Topstroom Benzaldehyd	V29 uit P31 in 25 Benzaldehyd
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					
Proceswater	0.9247	1.6330			
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur					
Benzaldehyde			11.3300	11.3300	11.3300
NaOH					
Benzoëzuur			0.0001	0.0001	0.0001
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride	2.5000				
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht		270.5270			
Totaal	3.4247	272.1600	11.3301	11.3301	11.3301

\*4 Deze stromen hebben 8 uur per 48 uur een waarde, om de rest van het bariumnitraat weg te halen. (zie cyclediagram)

\*5 Deze stromen werken 37 uur per 48 uur, aangezien het opwerken van de inhoud van R67 batchgewijs plaatsvindt. (zie cyclediagram)

**Bijlage 4F**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	P30 uit T27 in 26	P31 uit H36 in 27	H36 uit H37 in 28	H37 uit R22 in 29	T27 uit P33 in 30
STROOM Nr. :	refluxstroom	Benzaldehyd	Benzaldehyd	Benzaldehyd	bodemstr.
STROOM NAAM :	Benzaldehyd				destillatie
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					
Proceswater					
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur					
Benzaldehyde	1.1461	10.1839	10.1839	10.1839	0.0349
NaOH					
Benzoëzuur	0.0000	0.0001	0.0001	0.0001	0.0512
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	1.1461	10.1840	10.1840	10.1840	0.0861

## Bijlage 4G      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	P33 uit H34 in	H34 uit H35 in	H35 uit	P25 uit	P24 uit F26 in
STROOM Nr. :	31	32	33	34	35
STROOM NAAM :	Bodemstr. Benzoëzuur	Benzoëzuur	Benzoëzuur	koelwater	reactor- effluent
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					1.9549
Proceswater					96.1713
Koelwater				4023.9700	
MTBE					85.0267
Citroenzuur					0.9228
Benzaldehyde	0.0349	0.0349	0.0349		3.5639
NaOH					0.0268
Benzoëzuur	0.0512	0.0512	0.0512		0.0125
Mandelonitril					13.4062
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitriase					0.0007
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	0.0861	0.0861	0.0861	4023.9700	201.0858

**Bijlage 4H**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	F62 uit	P2 uit V38 in	V38 in	P2 uit	V38 uit
STROOM Nr. :	36	37	38	39	40
STROOM NAAM :	enzymafval	Zwavelzuur	reactor- effluent	Zwavelzuur	organische fase
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide	0.0040		1.9509		0.5428
Proceswater	0.0228	0.0001	96.1485	0.0003	12.7693
Koelwater					
MTBE	0.0006		85.0261		83.6651
Citroenzuur			0.9228		0.1676
Benzaldehyde			3.5639		3.5331
NaOH			0.0268		0.0075
Benzoëzuur			0.0125		0.0124
Mandelonitril			13.4062		13.2933
Zwavelzuur		0.0054	0.0054	0.0138	0.0015
Waterstoffluoride					
R-oxynitrilase	0.0007				
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
<b>Totaal</b>	<b>0.0281</b>	<b>0.0055</b>	<b>201.0632</b>	<b>0.0141</b>	<b>113.9926</b>

**Bijlage 4I**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	P1 uit	T 47 in	T47 uit H48 in	H48 uit V49 in	V49 uit P51 in
STROOM Nr. :	41	42	43	44	45
STROOM NAAM :	HF	Feedstroom destillatie	Topstroom destillatie	Topstroom HF/HCN/ MTBE	HF/HCN MTBE
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide		0.5428	0.6186	0.6186	0.6186
Proceswater	1.1100	13.8793	9.7982	9.7982	9.7982
Koelwater					
MTBE		83.6651	95.6080	95.6080	95.6080
Citroenzuur		0.1676			
Benzaldehyde		3.5331	4.0383	4.0383	4.0383
NaOH		0.0075			
Benzoëzuur		0.0124			
Mandelonitril		13.2933	0.5975	0.5975	0.5975
Zwavelzuur		0.0015			
Waterstoffluoride	3.0000	3.0000	3.4281	3.4281	3.4281
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	4.1100	118.1026	114.0886	114.0886	114.0886

**Bijlage 4J**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	P50 uit T47 in 46	P51 uit H55 in 47	H55 uit T56 in 48	T47 uit P53 in 49	P53 uit H54 in 50
STROOM Nr. :					
STROOM NAAM :	refluxstroom HF/HCN MTBE	HF/HCN MTBE	HF/HCN MTBE	bodemstr. destillatie	Bodemstr. mandelo- nitril/water
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide	0.0771	0.5415	0.5415		
Proceswater	1.2224	8.5758	8.5758	5.3070	5.3070
Koelwater					
MTBE	11.9423	83.6657	83.6657		
Citroenzuur				0.1677	0.1677
Benzaldehyde	0.5041	3.5342	3.5342	0.0046	0.0046
NaOH				0.0075	0.0075
Benzoëzuur				0.0124	0.0124
Mandelonitril	0.0741	0.5234	0.5234	12.7912	12.7912
Zwavelzuur				0.0015	0.0015
Waterstoffluoride	0.4281	3.0000	3.0000		
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
<b>Totaal</b>	<b>14.2481</b>	<b>99.8407</b>	<b>99.8407</b>	<b>18.2918</b>	<b>18.2918</b>

**Bijlage 4K**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	H54 uit	T56 uit	H57 uit	V58 uit	P59 uit
STROOM Nr. :	51	H57 in 52	V58 in 53	T56 in 54	H66 in 55
STROOM NAAM :	Mandelo- nitril/water	Topstroom destillatie	Topstroom HF/HCN	refluxstroom HF/HCN	HF/HCN
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide		0.8497	0.8497	0.3082	0.5415
Proceswater	5.3070	0.0055	0.0055	0.0021	0.0034
Koelwater					
MTBE	0.1677	4.9010	4.9010	1.7798	3.1212
Citroenzuur	0.0046				
Benzaldehyde	0.0075				
NaOH	0.0124				
Benzoëzuur	12.7912				
Mandelonitril	0.0015				
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride		4.7101	4.7101	1.7101	3.0000
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	18.2918	10.4662	10.4662	3.8001	6.6660

**Bijlage 4L**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	T56 uit P61 in	P61 uit H62 in	H62 uit	H66 uit R67 in	R67 uit H68 in
STROOM Nr. :	56	57	58	59	60
STROOM NAAM :	Bodemstr. destillatie	Bodemstr. MTBE	MTBE	HF/HCN	recyclestr. HCN
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide	0.1062	0.1062	0.1062	0.5415	0.5415
Proceswater	8.5724	8.5724	8.5724	0.0034	0.0034
Koelwater					
MTBE	80.5447	80.5447	80.5447	3.1212	3.1212
Citroenzuur					
Benzaldehyde	3.9512	3.9512	3.9512		
NaOH					
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride				3.0000	
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
<b>Totaal</b>	<b>93.1748</b>	<b>93.1748</b>	<b>93.1748</b>	<b>6.6661</b>	<b>3.6661</b>



**Bijlage 4M**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. :	H68 uit P65 in	P65 uit V64 in	V69 in	P71 uit H70 in	H70 uit
STROOM Nr. :	61	62	63	64	65
STROOM NAAM :	recyclestr. HCN	recyclestr. HCN	verwarmings str. water	verwarmings str. water	verwarmings str. water
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide	0.5415	0.5415			
Proceswater	0.0034	0.0034			
Koelwater			2253.7600	2253.7600	2253.7600
MTBE	3.1212	3.1212			
Citroenzuur					
Benzaldehyde					
NaOH					
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	3.6661	3.6661	2253.7600	2253.7600	2253.7600

**Bijlage 4N**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. : STROOM NR. : STROOM NAAM	koelmantel R67 in 66 verwarmings str. water	V38 uit V39 in 67 waterfase	V39 uit H40 in 68 gasstroom waterfase	H40 uit H41 in 69 waterfase	H41 uit V42 in 70 waterfase
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide		1.4081	1.4288	1.4288	1.4288
Proceswater		83.3793	82.3806	82.3806	82.3806
Koelwater	1126.8800				
MTBE		1.3609	1.3608	1.3608	1.3608
Citroenzuur		0.7552			
Benzaldehyde		0.0308	0.1204	0.1204	0.1204
NaOH		0.0194			
Benzoëzuur		0.0001	0.0001	0.0001	0.0001
Mandelonitril		0.1129			
Zwavelzuur		0.0039			
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> ·10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	1126.8800	87.0706	85.2908	85.2908	85.2908

## Bijlage 40      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	R81 in	V42 uit P43 in	P43 uit	V39 uit P88 in	P88 uit H44 in
STROOM Nr. :	71	72	73	74	75
STROOM NAAM :	mandelonitril en water	waterfase	waterfase	zoutslurry	zoutslurry
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide		1.4288	1.4288	0.0023	0.0023
Proceswater	5.3073	82.3806	82.3806	0.9986	0.9986
Koelwater					
MTBE		1.3608	1.3608	0.0002	0.0002
Citroenzuur	0.1677			0.7552	0.7552
Benzaldehyde	0.0046	0.1204	0.1204	0.0003	0.0003
NaOH	0.0075			0.0194	0.0194
Benzoëzuur	0.0124	0.0001	0.0001		
Mandelonitril	12.7912				
Zwavelzuur	0.0153			0.0039	0.0039
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	18.3060	85.2908	85.2908	1.7798	1.7798

**Bijlage 4P**      **Stroom/componentenstaat**

APPARAAT Nr. : STROOM Nr. : STROOM NAAM :	H44 uit H45 in 76 zoutslurry	H45 uit 77 zoutslurry	F72 uit 78 mandelo- nitril	P75 uit 79 mandelo- nitril	P76 uit T77 in 80 mandelo- nitril
Waterstofcyanide	0.0023	0.0023			
Proceswater	0.9986	0.9986	0.0516	0.0430	0.0086
Koelwater					
MTBE	0.0002	0.0002			
Citroenzuur	0.7552	0.7552	0.1945	0.1621	0.0324
Benzaldehyde	0.0003	0.0003	0.0053	0.0044	0.0009
NaOH	0.0194	0.0194			
Benzoëzuur			0.0144	0.0120	0.0024
Mandelonitril			14.8337	12.3614	2.4723
Zwavelzuur	0.0039	0.0039	0.0071	0.0059	0.0012
Waterstoffluoride					
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	1.7798	1.7798	15.1066	12.5888	2.5178

## Bijlage 4Q      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	F72 uit M73 in	M73 uit M74 in	M74 in	T77 in	M74 uit
STROOM Nr. :	81	82	83	84	85
STROOM NAAM :	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O	droge lucht	droge lucht	natte lucht
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					0.0872
Proceswater	0.0015	0.0015	0.3067	0.0022	5.5657
Koelwater					
MTBE					
Citroenzuur	0.0056	0.0056			0.0056
Benzaldehyde	0.0002	0.0002			0.3424
NaOH					
Benzoëzuur	0.0004	0.0004			0.0004
Mandelonitril	0.4298	0.4298			
Zwavelzuur	0.0002	0.0002			0.0002
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	2.1515	2.1515			
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O	9.4081	9.4081			
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht			510.8933	0.3578	510.8933
Totaal	11.9973	11.9973	511.2000	0.36	516.8948

## Bijlage 4R Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	M74 uit R78 in	T77 uit R78 in	M74 uit zoutpurge 88	P79 uit 89	P80 uit R81 in 90
STROOM Nr. :	86	87	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> purge	koelwater	mandelonitri en Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
STROOM NAAM :	natte lucht	droge man- delonitril			
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide					
Proceswater					
Koelwater				223.4000	
MTBE					
Citroenzuur		0.0324			0.0324
Benzaldehyde		0.0009			0.0009
NaOH					
Benzoëzuur		0.0024			0.0024
Mandelonitril		2.4723			2.4723
Zwavelzuur		0.0012			0.0012
Waterstoffluoride					
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	6.3020		0.0133		6.2887
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride					
Salpeterzuur					
Lucht					
Totaal	6.3020	2.5092	0.0133	223.4000	8.7979

## Bijlage 4S      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	P82 uit	P83 uit F72 in	T77 uit	P84 uit F85 in	F85 uit
STROOM Nr. :	91	92	93	94 <sup>*5</sup>	95 <sup>*5</sup>
STROOM NAAM :	koelwater	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O mandelonitril	natte lucht	H <sub>2</sub> O, BaF <sub>2</sub> , HNO <sub>3</sub>	HNO <sub>3</sub> , HCN opl.
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide				0.2081	0.2075
Proceswater		0.0531	0.0108	139.8984	139.4946
Koelwater	1783.5800				
MTBE					
Citroenzuur		0.2001			
Benzaldehyde		0.0055			
NaOH					
Benzoëzuur		0.0148			
Mandelonitril		15.2635			
Zwavelzuur		0.0073			
Waterstoffluoride				0.0541	0.0539
R-oxynitilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>		2.1515			
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O		9.4081			
Bariumnitraat					
Bariumfluoride				18.9514	
Salpeterzuur				13.6216	13.5823
Lucht			0.3578		
Totaal	1783.5800	27.1039	0.3686	172.7336	153.3383

\*5 Deze stromen werken 37 uur per 48 uur, aangezien het opwerken van R67 batchgewijs plaatsvindt. (zie cyclediagram)

## Bijlage 4T      Stroom/componentenstaat

APPARAAT Nr. :	M86 uit	F85 uit M86 in	M86 uit	P63 uit	R22 in recycle
STROOM Nr. :	96 <sup>*5</sup>	97 <sup>*5</sup>	98 <sup>*5</sup>	99	100
STROOM NAAM :	natte lucht	natte BaF <sub>2</sub>	droge BaF <sub>2</sub>	MTBE, H <sub>2</sub> O benzaldehyde	MTBE, H <sub>2</sub> O benzaldehyd
COMPONENTEN					
Waterstofcyanide	0.0006	0.0006		0.6477	2.0765
Proceswater	2.0368	0.4038		8.5758	90.9565
Koelwater					
MTBE				83.6659	85.0267
Citroenzuur					
Benzaldehyde				3.95119	4.0716
NaOH					
Benzoëzuur					
Mandelonitril					
Zwavelzuur					
Waterstoffluoride	0.0002	0.0002			
R-oxynitrilase					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>					
Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O					
Bariumnitraat					
Bariumfluoride		18.9514	18.9514		
Salpeterzuur	0.0393	0.0393			
Lucht	270.5270				
Totaal	272.6038	19.3952	18.9514	96.8406	182.1312

\*5 Deze stromen werken 37 uur per 48 uur, aangezien het opwerken van R67 batchgewijs plaatsvindt. (zie cycliediagram)



## Bijlage 5A Warmtebalans van het gehele proces

Stroom nr.	Q(kW)		Stroom nr.	Q(kW)
1	0.9743		26	0.2008
2	0.0024		27	1.7841
3	0.0035		28	1.5010
4	0.6596		29	1.3225
5 <sup>*1</sup>	19.8603		30	0.0184
6 <sup>*1</sup>	704.2387		31	0.0184
7 <sup>*1</sup>	724.0990 877.6762 <sup>*6</sup>		32	0.0159
8	<sup>*2</sup>		33	0.0133
9	0.0032		34	323.2190 325.4242 <sup>*6</sup>
10	0.0084		35	53.0623
11	0.0116		36	0.0093
12	1.2579		37	0.0007
13	0.0948		38	53.0537
14	0.5415		39	0.0017
15	0.6363		40	21.4279
16	1.9057		41	0.9743
17	1.3355		42	22.4022
18	0.00002 <sup>*3</sup>		43	21.0589
19	43.9621 68.7921 <sup>*6</sup>		44	19.0359
20 <sup>*1</sup>	0.6626		45	19.0359
21 <sup>*4</sup>	0.8118		46	2.3773
22 <sup>*5</sup>	23.7780 41.5180		47	16.6586
23	3.3149		48	18.2636
24	1.9849		49	3.7638
25	1.9849		50	3.7638

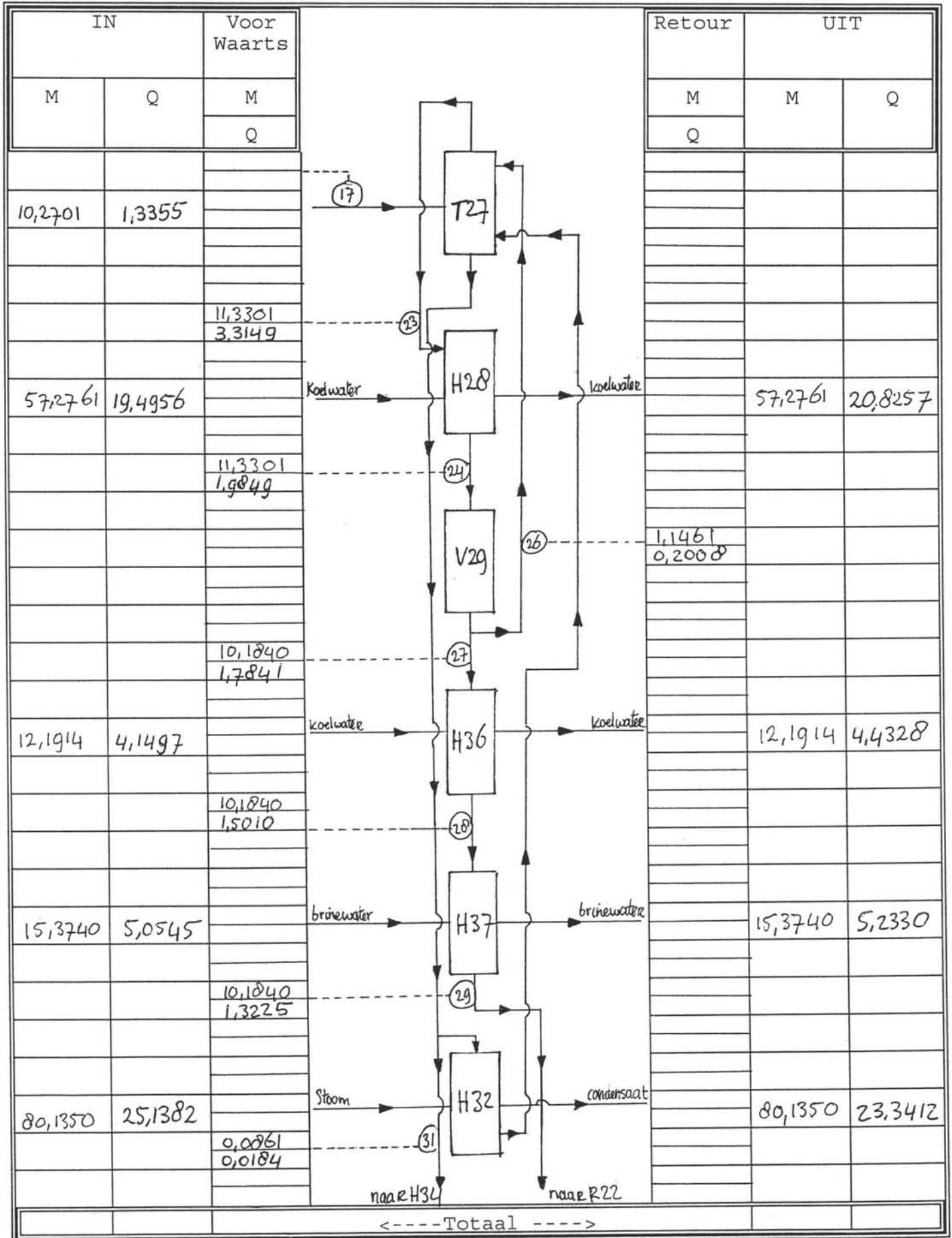
## Bijlage 5B Warmtebalans van het gehele proces

Stroom nr.	Q(kW)		Stroom nr.	Q(kW)
51	3.6705		76	2.3265
52	44.2200		77	2.2685
53	1.5819		78	1.9919
54	0.5744		79	1.6349
55	1.0075		80	0.3570
56	20.0580		81	2.3429
57	20.0580		82	2.3429
58	17.7320		83	68.7445
59	2.8275		84	0.0476
60	2.0398		85	68.7048
61	1.8610		86	2.3826
62	1.8610		87	0.3540
63	912.1880		88	0.0050
64	912.1880		89	77.0645 77.4851* <sup>6</sup>
65	937.4186		90	2.7303
66	468.7093		91	615.2673 617.3661* <sup>6</sup>
67	31.6258		92	4.3340
68	89.3555		93	0.0506
69	33.2818		94* <sup>5</sup>	59.5395
70	29.5738		95* <sup>5</sup>	58.6360
71	3.6722		96* <sup>5</sup>	41.6771
72	29.5738		97* <sup>5</sup>	0.9034
73	29.5738		98* <sup>5</sup>	0.7444
74	2.3903		99	19.5930
75	2.3903		100	49.1668

---

## Bijlage 5C                      Warmtebalans van het gehele proces

- \*1        Deze stromen hebben 2.5 uur per 48 uur een waarde, aangezien het vullen van R67 batchgewijs plaatsvindt. (Zie cyclediagram)
- \*2        Dit is een stroom die het regelvat pas in gaat als het niveau in dit vat daalt, dus is hiervan geen waarde bekend.
- \*3        Dit is een stroom die het regelvat in gaat. Er gaat al een continue stroom van 0.0001 kg/hr in. Deze stroom neemt pas in grote toe als het niveau in dit vat daalt, dus is hiervan geen exacte waarde bekend.
- \*4        Deze stroom heeft 8 uur per 48 uur een waarde, om de rest van het bariumnitraat in de reactor om te zetten naar bariumfluoride. (Zie cyclediagram)
- \*5        Deze stroom heeft 37 uur per 48 uur een waarde, aangezien het opwerken van de inhoud van R67 batchgewijs plaatsvindt. (Zie cyclediagram)
- \*6        Dit zijn dezelfde stromen als hierboven vermeld staan, met hun energieinhoud berekend, na opwarmen van deze stromen.

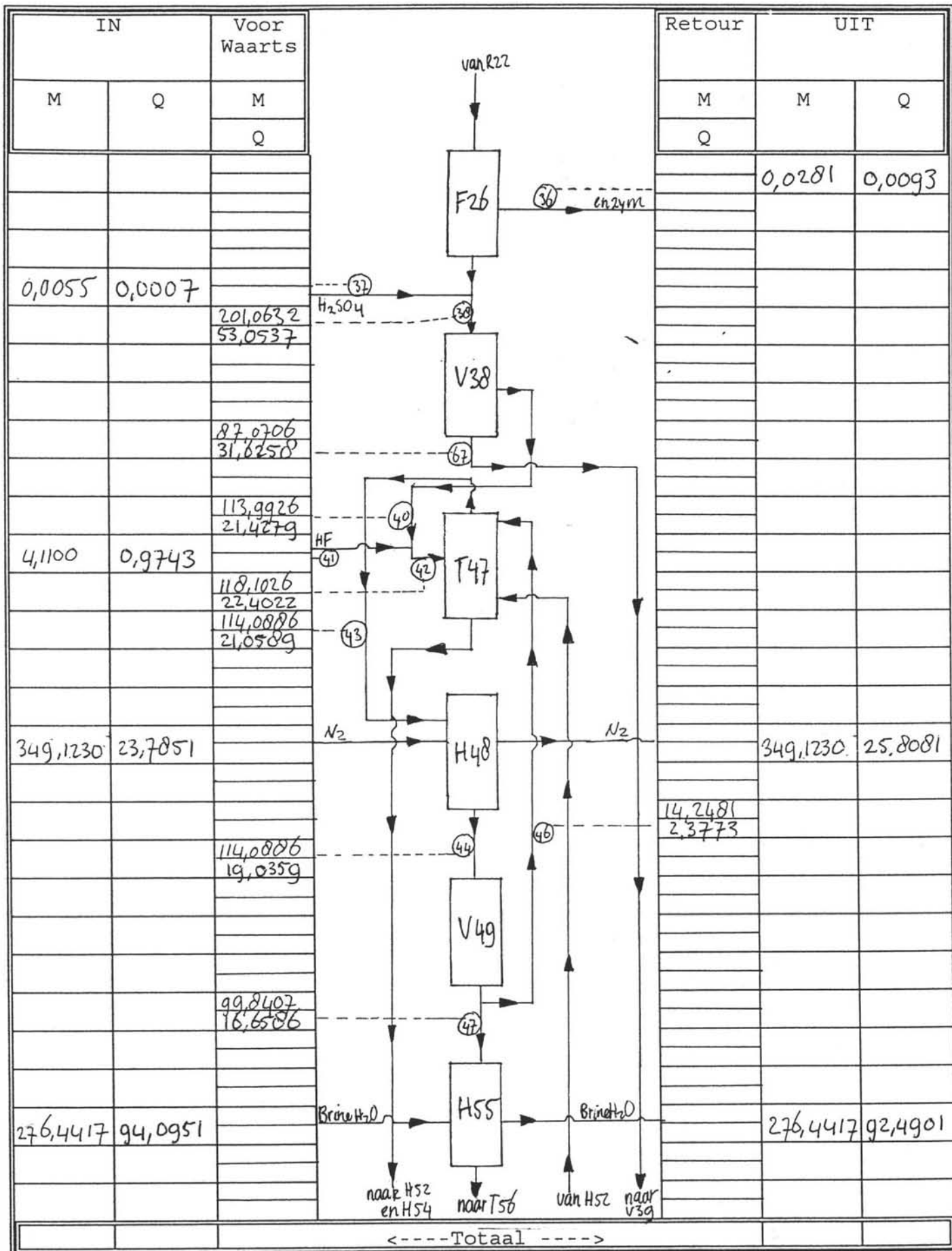


Massa in kg/hr

Warmte in kW

IN		Voor Waarts	van H37 (29)	van T27 (31)	Retour	UIT	
M	Q					M	Q
0,1112	0,0379				0,1112	0,0404	
		0,0861 0,0159					
0,2082	0,0684				0,2082	0,0709	
21,7833**	1,0344**				0,0861	0,0133	
107,8383**	36,6791**						
		129,6220** 37,7135**					
4,0268	0,0032						
0,0241	0,0084						
		0,0509 0,0116					
0,9228	0,0948						
1,5590	0,5415						
3,6219	1,2579						
2,6012	0,6596						
		2,4818 0,6363					
	9,3686 <sup>+3</sup>						
4023,9700	1376,2313					0,5896 <sup>+4</sup>	
0,0107	0,0035				4023,9700	1385,0102	
		20,1058 53,0623					
		<-----Totaal----->					

massa in kg/uur  
warmte in kW



massa in kg/uur  
Warmte in kW

IN		Voor Waarts	Retour		UIT	
M	Q	M	M	Q	M	Q
		Q				
11,0859	2,6314		11,0859	2,4480		
		18,2910 3,7030				
8,0380	2,6426		8,0380	2,7360		
		18,2910 3,6705				
0,0141	0,0017					
		18,3060 3,6722 99,8407 18,2636 10,4662 44,2200				
3672,3926	1207,3674		3672,3926	1250,0074		
		10,4662 1,5819				
170,5521	40,4831		170,5521	38,6631		
		6,6661 1,0075				
<---- Totaal ---->						

massa in kg/uur  
warmte in kW

IN		Voor Waarts	Retour		UIT	
M	Q	M	M	Q	M	Q
2726,3804	647,1469	stoom	2726,3804	601,7069		
		93,1740 20,0500				
200,3681	65,8747	brineH <sub>2</sub> O	200,3681	68,2007		
		93,1740 17,7320				
15,3988	5,0626	brineH <sub>2</sub> O	15,3988	5,2414		
		3,6661 1,0610			96,8406 19,5930	
0,0001 <sup>*2</sup>	0,0002 <sup>*2</sup>	-10				
80,1778	19,8066	stoom	80,1778	-40,3134		
		87,0706 31,6258 85,2908 89,3555 1,7790 2,3903				
2,7472	0,9351	koelH <sub>2</sub> O	2,7472	0,9989		
		naarH45 naarH40 uitR6j				
		-----Totaal-----				

massa in kg/uur  
warmte in kW

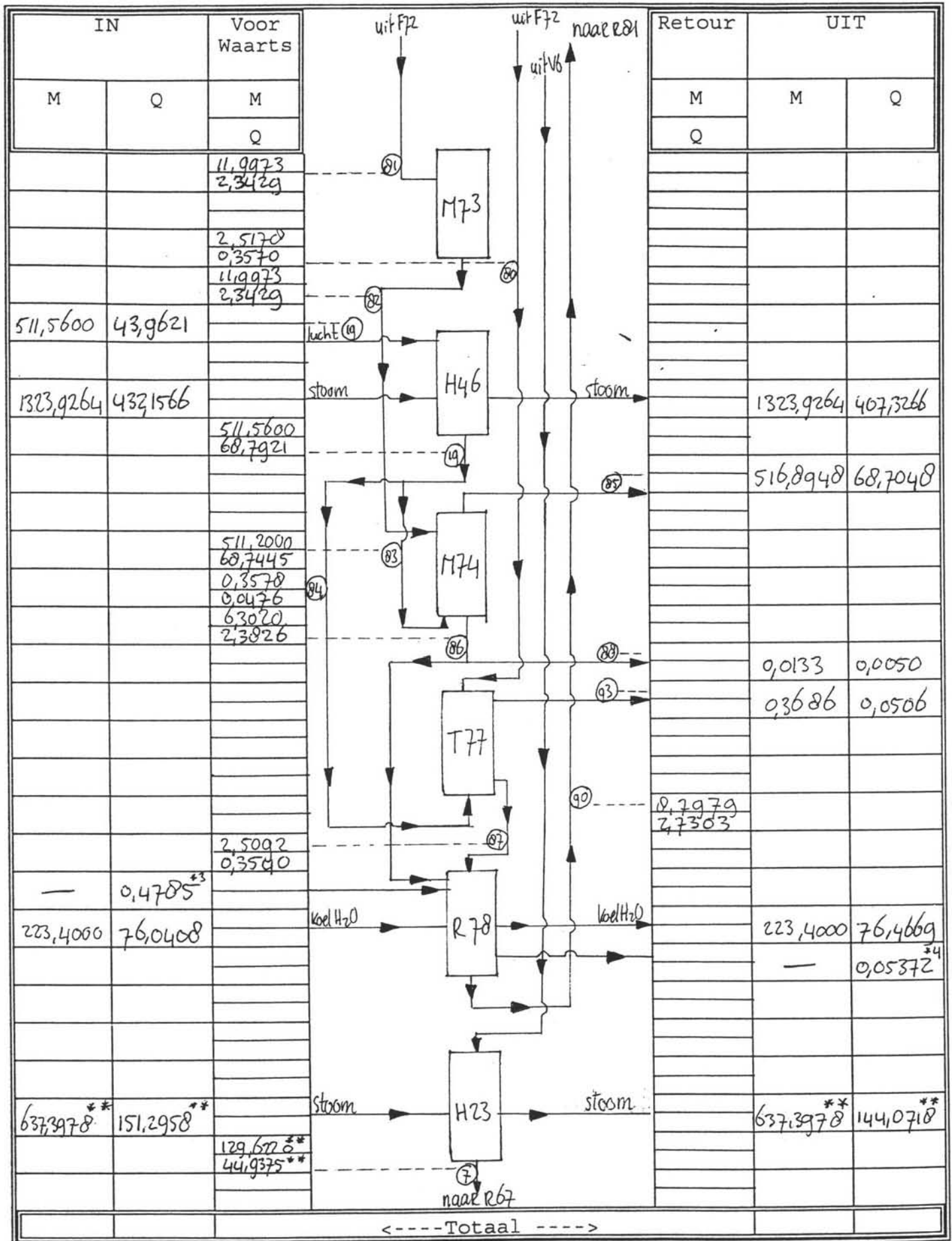




Dy lage 0.5

# Massa en warmtebalans bij procesflowschema

FVONR. 3186



Massa in kg/uur

Warmte in kW



## Bijlage 6I Massa en warmtebalans bij procesflowschema

### Opmerkingen:

- \*1 Dit is een stroom die het regelvat pas in gaat als het niveau in dit vat daalt, dus is van deze energie en massa geen waarde bekend.
- \*2 Dit is een stroom die het regelvat in gaat. Er gaat al een continue stroom van 0.0001 kg/hr in. Deze stroom neemt pas in grote toe als het niveau in dit vat daalt, dus is hiervan geen exacte waarde bekend van massa en energie.
- \*\* Deze stromen zijn in principe batchgewijs (zie bijlage 5 warmtebalans van het gehele proces). Om de massa en energiebalans kloppend te krijgen zijn deze stromen omgerekend tot continue stromen zodat alle waarden kunnen worden opgeteld.

Als voorbeeld: Omrekenen van stroom 5 naar een continue waarde:

$$\phi_{w5} = 19.8603 \text{ kW} \quad \text{Deze waarde is 2.5 uur per 48 uur aanwezig.}$$

Dit kan nu worden omgerekend naar een continue stroom:

$$\phi_{w\text{continu}} = \phi_{w5} * (2.5 \text{ uur} / 48 \text{ uur}) = 1.0344 \text{ kW}$$

$\phi_{w5}$	:	energieinhoud stroom 5, geldende voor 2.5 uur
$\phi_{w\text{continu}}$	:	continue energieinhoud stroom 5

- Alle andere continue energiestromen kunnen ook op deze manier worden berekend.*  
*-De continue massastromen kunnen eveneens op deze manier worden bepaald.*

- \*3 Warmteïnbreng in het systeem door roeren in de reactor.  
 \*4 Warmteafvoer door afgifte van warmte naar de omgeving.

**Bijlage 7A****Specificatielijst pompen**

Apparaat Nr.	P1	P2	P3	P4
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	Waterstoffluoride	Zwavelzuur	Enzym oplossing	Waterstofcyanide
Capaciteit (kg/hr) :	4.1100	0.0196	0.0107	2.6012
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	950.00	1836.00	1100.00	684.00
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	15 15	22 22	22 22	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0160	<0.0001	<0.0001	0.0141
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	100	100	100	100

## Bijlage 7B

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P5 <sup>*1</sup>	P7 <sup>*1</sup>	P8	P9
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	Water	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> - oplossing	Water	Water
Capaciteit (kg/hr) :	2070.496	2488.736	*2	0.0241
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	996.00	1373.11	996.00	996.00
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	22 22	70 70	22 22	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	7.6993	6.7129	<0.0001	<0.0001
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig -Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	100	100	100	100

\*1 Deze pompen werken 2,5 uur per 48 uur, aangezien het bariumnitraatvat batchgewijs wordt gevuld.

\*2 De capaciteit van deze pomp kan niet exact worden berekend aangezien deze pomp pas een toevoeging moet doen als het level in V42 daalt. Het berekende vermogen is dan dus ook een schatting bij deze pomp.

## Bijlage 7C

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P11	P12	P13	P15
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	NaOH-oplossing	Water	Citroenzuur- oplossing	Water
Capaciteit (kg/hr) :	0.0509	3.6219	2.4818	1.5590
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	1577.28	996.00	1183.40	996.00
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	22 22	22 22	22 22	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0001	0.0135	0.0078	0.0058
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	100	100	100	100

## Bijlage 7D

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P16	P17	P18	P19* <sup>1</sup>
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Blower Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	Benzaldehyde	MTBE	Lucht	Waterstofcyanide
Capaciteit (kg/hr) :	10.2701	*3	511.5600	3.0800
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	1044.13	738.00	1.129	684.00
Zuigdruk(bar): Persdruk (bar):	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in ('C) : Temp uit ('C):	22 22	22 22	25 25	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0364	<0.0001	1678.1813	0.0167
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	roestvast staal 100	100	2118.40	100

<sup>1</sup> Deze pompen werken 2,5 uur per 48 uur, aangezien het bariumnitraatvat batchgewijs wordt gevuld.

- \*3 De capaciteit van deze pomp kan niet exact worden berekend aangezien deze pomp pas een extra toevoeging moet doen als het level in V64 daalt. Het berekende vermogen is dan dus ook een schatting bij deze pomp. (De pomp levert in ieder geval een continue stroom van 0.0001 kg/hr)



## Bijlage 7E

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P20 <sup>*4</sup>	P21 <sup>*5</sup>	P24	P25
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Blower Centrifugaal	effluent pomp Centrifugaal	doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	Waterstoffluoride	Lucht	Reactoreffluent	Koelwater
Capaciteit (kg/hr) :	3.4246	272.1600	201.0860	4023.9700
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	950.00	1.129	894.11	996.00
Zuigdruk(bar): Persdruk (bar):	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C):	15 15	25 25	22 22	20 20
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0134	892.8255	0.8330	14.9634
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	100	1278.60	roestvast staal 100	100

\*4 Deze pomp werkt 8 uur per 48 uur, aangezien het overige bariumnitraat nog moet worden weggehaald met HF.

\*5 Deze pomp werkt 37 uur per 48 uur, aangezien de opwerking van het bariumnitraatvat batchgewijs wordt uitgevoerd.

## Bijlage 7F

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P30	P31	P33	P43
Benaming : Type :	Refluxpomp Centrifugaal	Destill. pomp Centrifugaal	Destill. pomp Centrifugaal	Recyclepomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	Benzaldehyde	Benzaldehyde	Benzoëzuur	Mengsel van: Water HCN en MTBE
Capaciteit (kg/hr) :	1.1461	10.1840	0.0861	85.2910
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	1043.00	1043.00	1177.987	986.723
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	0.15 1	0.15 1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	116.4 116.4	116.4 116.4	135.1 135.2	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0041	0.3074	0.0023	0.3200
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	roestvast staal 100	roestvast staal 100	roestvast staal 100	roestvast staal 100

## Bijlage 7G

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P50	P51	P53	P59
Benaming : Type :	Refluxpomp Centrifugaal	Destill. pomp Centrifugaal	Destill. pomp Centrifugaal	Destill. pomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	water en MTBE	HCN Water MTBE en waterstoffluoride	Mandelonitril en water	HCN, MTBE en Waterstoffluoride
Capaciteit (kg/hr) :	12.2481	99.8410	18.2920	6.6661
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	778.88	778.93	1074.07	829.17
Zuigdruk(bar): Persdruk(bar) :	1 1.1	0.05 1	0.05 1	1 1.1
Temp. in ('C) : Temp uit ('C):	-11 -11	-11 -11	30 30	35 35
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0678	4.5100	0.5990	0.0298
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	roestvast staal  100	roestvast staal  100	roestvast staal  100	  100

**Bijlage 7H****Specificatielijst pompen**

Apparaat Nr.	P61	P63	P65	P71
Benaming : Type :	Destill. pomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Recyclepomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal
Te verpompen medium :	HCN Water MTBE Benzaldehyde	HCN Water MTBE Benzaldehyde	HCN MTBE	Verwarmings- water
Capaciteit (kg/hr) :	93.1750	96.8406	3.6661	2253.7600
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	774.61	772.93	730.26	996.00
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.1
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	60.2 60.2	22 22	22 22	80 80
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.4460	0.4640	0.0186	8.3808
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	roestvast staal 100	roestvast staal 100	100	100

**Bijlage 7I****Specificatielijst pompen**

Apparaat Nr.	P75	P76	P79	P80
Benaming : Type :	Produkt pomp Centrifugaal	Recyclepomp Centrifugaal	Doseerpomp Centrifugaal	Drukpomp Piston
Te verpompen medium :	Mandelonitril	Mandelonitril	Koelwater	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> in mandelonitril
Capaciteit (kg/hr) :	12.6470	2.5178	223.4000	8.7979
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	1105.51	1105.51	996.00	2245.29
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.1	1 1.1	1 1.5
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	22 22	22 22	20 20	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	0.0424	0.0048	0.8307	0.0145
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)	roestvast staal  100	roestvast staal  100	  100	roestvast staal  100

## Bijlage 7J

## Specificatielijst pompen

Apparaat Nr.	P82	P83	P84 <sup>*5</sup>	P88
Benaming : Type :	Doseerpomp Centrifugaal	Drukpomp Piston	Effluentpomp Piston	Afvalpomp Piston
Te verpompen medium :	Koelwater	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> .10H <sub>2</sub> O in mandelonitril	BaF <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O HCN HNO <sub>3</sub>	HCN H <sub>2</sub> O Citroenzuur NaOH H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>
Capaciteit (kg/hr) :	1783.5800	27.1039	172.7336	1.7800
Dichtheid (kg/m <sup>3</sup> ) :	996.00	1355.00	1454.45	1223.39
Zuigdruk (bar): Persdruk (bar) :	1 1.1	1 1.3	1 1.3	1 1.3
Temp. in (°C) : Temp uit (°C) :	20 20	22 22	70 70	22 22
Vermogen (W) - Theorie: - Praktijk:	6.6324	0.0741	1.3196	0.0269
Aantal - Serie : - Parallel :	1	1	1	1
Overig - Speciaal te ge- bruiken materiaal -Prijs (Fl)		roestvast staal 100		roestvast staal 100

\*5 Deze pomp werkt 37 uur per 48 uur, aangezien de opwerking van het barium-nitratvat batchgewijs wordt uitgevoerd.

## Bijlage 8A

## Specificatieformulier torens

APPARAATNUMMER : T 27									
Algemene eigenschappen									
Functie: destillatie Type toren: gepakt bed Type schotel: Aantal schotels - theoretisch: - praktisch: - Voedingschotel(pract): Schotelafstand (HETS): Diameter toren: 0.30 [m] Hoogte toren: 0.79 [m] Materiaal toren: roestvast staal Verwarming: reboiler									
Bedrijfscondities									
	Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie-middel		Extrac-tie-middel
	Temp. [°C]		116.34		135.05				
	Druk [bar]		0.15		0.15				
	Dichtheid [kg/m <sup>3</sup> ]		1050.00		1180.90				
	Massastroom [kg/h]		10.18		0.09				
Temp. [°C]	Druk [bar]	Dichtheid [kg/m <sup>3</sup> ]	Massastroom [kg/h]	Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie-middel	
				116.34		135.05			
				0.15		0.15			
Dichtheid [kg/m <sup>3</sup> ]		1050.00		1180.90					
Massastroom [kg/h]		10.18		0.09					
Samenstelling									
		mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %
Benzaldehyde		99.6	99.5	100.0	100.0	42.9	40.5		
Benzoëzuur		0.4	0.5	0.0	0.0	57.1	59.5		
Ontwerp									
Aantal zeefgaten :					Type pakking : Pall				
Actief schoteloppervlak :					Materiaal pakking :				
Lengte overlooprand :					Afmetingen pakking				
Diameter valpijp :					- inhoud : 0.05 [m <sup>3</sup> ]				
					- lengte : 0.30 [m]				
					- breedte : 0.30 [m]				
					- hoogte : 0.68 [m]				

## Bijlage 8B

## Specificatieformulier torens

APPARAATNUMMER : T 47									
Algemene eigenschappen									
Functie : destillatie Type toren : gepakt bed Type schotel : Aantal schotels - theoretisch : - praktisch : - Voedingschotel(pract) : Schotelafstand (HETS) : Diameter toren : 0.32 [m] Hoogte toren : 0.96 [m] Materiaal toren : roestvast staal Verwarming : reboiler									
Bedrijfscondities									
	Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie- middel		Extractie- middel
Temp. [°C]	21.69		-10.96		29.22				
Druk [bar]	1.00		0.05		0.05				
Dichtheid [kg/m <sup>3</sup> ]	833.81		789.52		1075.23				
Massastroom [kg/h]	118.10		99.84		18.29				
	mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %	
Samenstelling:									
waterstofcyanide	0.993	0.460	1.225	0.542	0.000	0.000			
Water	38.065	11.752	29.161	8.589	75.191	29.013			
MTBE	46.895	70.841	58.145	83.780	0.000	0.000			
Citroenzuur	0.044	0.142	0.000	0.000	0.230	0.917			
Benzaldehyde	1.645	2.992	2.041	3.540	0.000	0.025			
Benzoëzuur	0.005	0.010	0.000	0.000	0.026	0.068			
Natronloog	0.010	0.006	0.000	0.000	0.051	0.041			
Mandelonitril	4.931	11.256	0.239	0.524	24.502	69.928			
Zwavelzuur	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.008			
Waterstoffluoride	7.411	2.540	9.189	3.005	0.000	0.000			
Ontwerp									
Aantal zeefgaten :					Type pakking : Pall				
Actief schoteloppervlak :					Materiaal pakking :				
Lengte overlooprand :					Afmetingen pakking				
Diameter valpijp :					- inhoud : 0.07 [m <sup>3</sup> ]				
					- lengte : 0.32 [m]				
					- breedte : 0.32 [m]				
					- hoogte : 0.84 [m]				



## Bijlage 8C

## Specificatieformulier torens

APPARAATNUMMER : T 56									
Algemene eigenschappen									
Functie: destillatie Type toren: gepakt bed Type schotel: Aantal schotels - theoretisch: - praktisch: - Voedingschotel(pract): Schotelafstand (HETS): Diameter toren: 0.36 [m] Hoogte toren: 1.09 [m] Materiaal toren: roestvast staal Verwarming: reboiler									
Bedrijfscondities									
	Voeding		Top		Bodem		Reflux-/ Absorptie- middel		Extractie- middel
Temp. [°C]	15.00		35.00		60.17				
Druk [bar]	1.00		1.00		1.00				
Dichtheid [kg/m <sup>3</sup> ]	789.67		836.07		786.35				
Massastroom [kg/h]	99.84		6.67		93.17				
	mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %	mol %	wt %	
Samenstelling									
Waterstofcyanide	1.225	0.542	9.728	8.123	0.000	0.000			
Water	29.161	8.589	0.097	0.051	33.350	9.200			
MTBE	58.145	83.799	17.218	46.823	64.043	86.445			
Benzaldehyde	2.040	3.540	0.000	0.000	2.334	3.793			
Mandelonitril	0.239	0.525	0.000	0.000	0.273	0.562			
waterstoffluoride	9.190	3.005	72.957	45.003	0.000	0.000			
Ontwerp									
Aantal zeefgaten :					Type pakking : Pall				
Actief schoteloppervlak :					Materiaal pakking :				
Lengte overlooprand :					Afmetingen pakking				
Diameter valpijp :					- inhoud : 0.10 [m <sup>3</sup> ]				
					- lengte : 0.36 [m]				
					- breedte : 0.36 [m]				
					- hoogte : 0.95 [m]				

## Bijlage 9                      Specificatielijst voor vaten

Apparaat nr.	V29	V49	V58	V69
Benaming	accumulatie vat	accumulatie vat	accumulatie vat	koelwater vat
Abs. druk [bar]	0.150	0.050	1.000	1.000
Temp. [°C]	116.3	-11.0	35.0	80.0
$\tau$ [h]	1.000	1.000	1.000	0.150
Inhoud [m <sup>3</sup> ]	0.011	0.144	0.012	0.338
Diameter [m]	0.191	0.451	0.197	0.599
H [m]	0.382	0.902	0.394	1.198
Speciale constructie-materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal
Aantal	1	1	1	1

Apparaat nr.	V64	V42	
Benaming Type	MTBE regel vat	water regel vat	
Abs. druk [bar]	1.000	1.000	
Temperatuur [°C]	22.0	22.0	
$\tau$ [h]	8.000	12.000	
Inhoud [m <sup>3</sup> ]	0.992	1.032	
Diameter [m]	0.858	0.869	
H [m]	1.716	1.738	
Speciale constructie-materialen	roestvast staal	roestvast staal	
Aantal	1	1	

**Bijlage 10****Specificatielijst voor verdamper**

Apparaat nr.	V39
Benaming Type	verdamer hairpin tubes
Medium - pijpen - mantel	stoom Process medium (HCN, H <sub>2</sub> O, MTBE, citric acid, benzadehyde, NaOH, mandelonitril)
Capaciteit uitgewisselde warmte [kW]	60.12
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ]	6.27
Aantal	1
Abs. druk [bar] - pijpen - mantel	1.7 bar 1.0 bar
Temp. in/uit [°C] - pijpen - mantel	115.2/115.2 22/101
Speciale constructie materialen	roestvast staal

**Bijlage 11****Specificatielijst voor zeoliet kolommen**

Apparaat nr.	T77A/B
Benaming Type	Zeoliet Kolom gepakt bed
Abs. druk [bar]	1
Temperatuur [°C]	25
Materiaal pakking	Zeoliet 4A
Dichtheid pakking [kg/m <sup>3</sup> ]	1270
Water capaciteit Pakking [wt%]	20
Porositeit kolom [-]	0.500
Diameter kolom [m]	0.120
Hoogte pakking [m]	0.288
Inhoud pakking [m <sup>3</sup> ]	0.003
Hoogte kolom [m]	0.360
Lucht debiet [kg/h]	0.360

## Bijlage 12                      Specificatielijst voor reactoren en mixers

Apparaat nr.	R22	R81	R67	R78
Benaming type	Enzymreactor CSTR, voorzien van koelmantel en 6-bladige Rushton turbine roerder	ontwateringsreactor CSTR, voorzien van koelmantel en 6-bladige Rushton turbine roerder	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> reactor CSTR, voorzien van koelmantel en 6-bladige Rushton turbine roerder	Slurrymenger CSTR, voorzien van koelmantel en 6-bladige Rushton turbine roerder
Abs. druk [bar]	1 bar	1 bar	1 bar	1 bar
Temperatuur [°C]	22	22	70	22
Inhoud [m <sup>3</sup> ] Diameter [m] L of H [m]	3.636 1.937 3.875	0.143 0.659 1.318	6 2.289 4.579	0.1 0.585 1.170
Roerder hoogte [m] Roerder Diam. [m]	0.116 0.582	0.079 0.396	0.138 0.688	0.070 0.351
Roerdertal [1/s]	3	3	2	2
Speciaal te gebruiken materiaal	roestvast staal	carbon steel	roestvast staal	carbon steel
Wanddikte [m]	0.02	0.01	0.04	0.01

## Bijlage 13

## Specificatielijst voor mengvaten

Apparaat nr.	V6	V10	V14
Benaming type	Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> mengvat CSTR, voorzien van 6-bladige Rushton turbine roerder	NaOH-mengvat CSTR, voorzien van 6-bladige Rushton turbine roerder	Citroenzuurbuffer- mengvat CSTR, voorzien van 6-bladige Rushton turbine roerder
Abs. druk [bar]	1 bar	1 bar	1 bar
Temperatuur [°C]	22	22	22
Inhoud [m <sup>3</sup> ] Diameter [m] L of H [m]	8 2.520 5.040	2.5*10 <sup>-3</sup> 0.171 0.342	2.5*10 <sup>-3</sup> 0.171 0.342
Roerder hoogte [m] Roerder Diam. [m]	0.151 0.757	0.010 0.051	0.010 0.051
Roerdertal [1/s]	0.1	4	4
Speciaal te gebruiken materiaal	carbon steel	carbon steel	carbon steel

**Bijlage 14 Specificatie tabellen zoutopvangvat en transportschroef**

Apparaat nr.	M73
Benaming	zoutopvangvat
Type	opslagtank
Inhoud [m <sup>3</sup> ]	0.1
Diameter [m]	0.585
L of H [m]	1.170
Materiaal	carbon steel

Apparaat nr.	M73
Benaming	transportschroef
Lengte [m]	2
Diameter [m]	0.15
Materiaal	carbon steel

**Bijlage 15** specificatielijst filters

Apparaat nr.	F26	F72	F85*
Benaming	Enzymfilter	Na <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> filter	BaF2 filter
Type	Nutsche, Rosenmundfilter	Nutsche, Rosenmundfilter	Nutsche, Rosenmundfilter
Oppervlak [m <sup>2</sup> ]	1	5	5
materiaal: weave: yarn:	- cellulose acetaat (membraan filter)	- polypropyleen - satin - monofilament	- polypropyleen - satin - monofilament

\* Dit apparaat werkt 37 uur per 48 uur.



**Bijlage 16 specificatielijst settler**

Apparaat nr.	V38
Benaming Type	settler verticale settler
Inhoud [m <sup>3</sup> ] Diameter [m] L of H [m]	0.0453 0.303 0.605
Invoerpijp diam. [cm] Invoerpijp hoogte [m] Waterafvoer hoogte [m] MTBE afvoer hoogte [m]	2.77 0.303 0.491 0.545
Materiaal	roestvast staal

## Bijlage 17A      Specificatielijsten voor warmtewisselaars

Apparaat nr.	H36	H37	H41	H62
Benaming : Type :	koeler fixed tube	koeler fixed tube	koeler fixed tube	koeler fixed tube
Medium - pijpen : - mantel :	benzaldehyde koelwater	benzaldehyde brine water	water brine water	MTBE brine water
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW]:	0.283	0.179	3.708	2.326
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ):	0.0189	0.0299	0.233	0.388
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	450	350	650	350
Warmtecapaciteit koelmedium [kJ/kgK]	4.18	4.18	4.18	4.18
Abs. druk [bar]: - pijpen : - mantel :	1 1	1 1	1 1	1 1
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	116.4/60 20/40	60/22 10/20	60/22 10/20	60.2/22 10/20
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal

## Bijlage 17B      Specificatielijsten voor warmtewisselaars

Apparaat nr.	H68 <sup>*1</sup>	H34	H35	H54
Benaming : Type :	koeler fixed tube	koeler fixed tube	koeler fixed tube	koeler fixed tube
Medium - pijpen : - mantel :	MTBE brine water	benzoëzuur koelwater	benzoëzuur brine water	mandelonitril brine water
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW]:	0.179	0.0026	0.0024	0.0933
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ):	0.0261	0.00012	0.00071	0.0335
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	350	475	350	300
Warmtecapaciteit koelmedium [kJ/kgK]	4.18	4.18	4.18	4.18
Abs. druk [bar]: - pijpen : - mantel :	1 1	1 1	1 1	1 1
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	70/22 10/20	135.1/79 20/40	79/22 10/20	29.2/22 10/20
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal

\*1 Dit apparaat werkt 37 uur per 48 uur.

**Bijlage 17C**      **Specificatielijsten voor warmtewisselaars**

Apparaat nr.	H44	H45	H70	H23 <sup>*2</sup>
Benaming : Type :	koeler fixed tube	koeler fixed tube	verwarmer fixed tube	verwarmer fixed tube
Medium - pijpen : - mantel :	zoutslurry koelwater	zoutslurry brine water	stoom water	stoom Ba(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> oplossing
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW]:	0.0638	0.0580	25.120	138.700
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ]:	0.0054	0.0116	1.656	12.0800
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	375	325	1200	550
warmtecapaciteit koelmedium/stoom [kJ/kgK]	4.18	4.18	2.04	2.04
Abs. druk [bar]: - pijpen : - mantel :	1 1	1 1	1 1	1 1
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	101/60 20/40	60/22 10/20	100/90 70.2/80	100/80 22/70
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal

<sup>\*2</sup> Dit apparaat werkt 2.5 uur per 48 uur.

## Bijlage 17D      Specificatielijsten voor warmtewisselaars

Apparaat nr.	H55	H66	H46	H87
Benaming : Type :	verwarmer fixed tube	verwarmer fixed tube	verwarmer floating head	verwarmer floating head
Medium - pijpen : - mantel :	MTBE koelwater	stoom MTBE	stoom droge lucht	stoom droge lucht
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW] :	1.605	1.820	24.830	17.74
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ]:	0.5137	0.1808	0.9968	0.489
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	250	550	500	500
Warmtecapaciteit koelwater/stoom [kJ/kgK]	4.18	2.04	2.25	2.25
Abs.druk [bar]: - pijpen : - mantel :	1 1	1 1	10 1	10 1
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	-11/15 20/15	100/80 35/70	240/210 25/200	240/200 25/150
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal

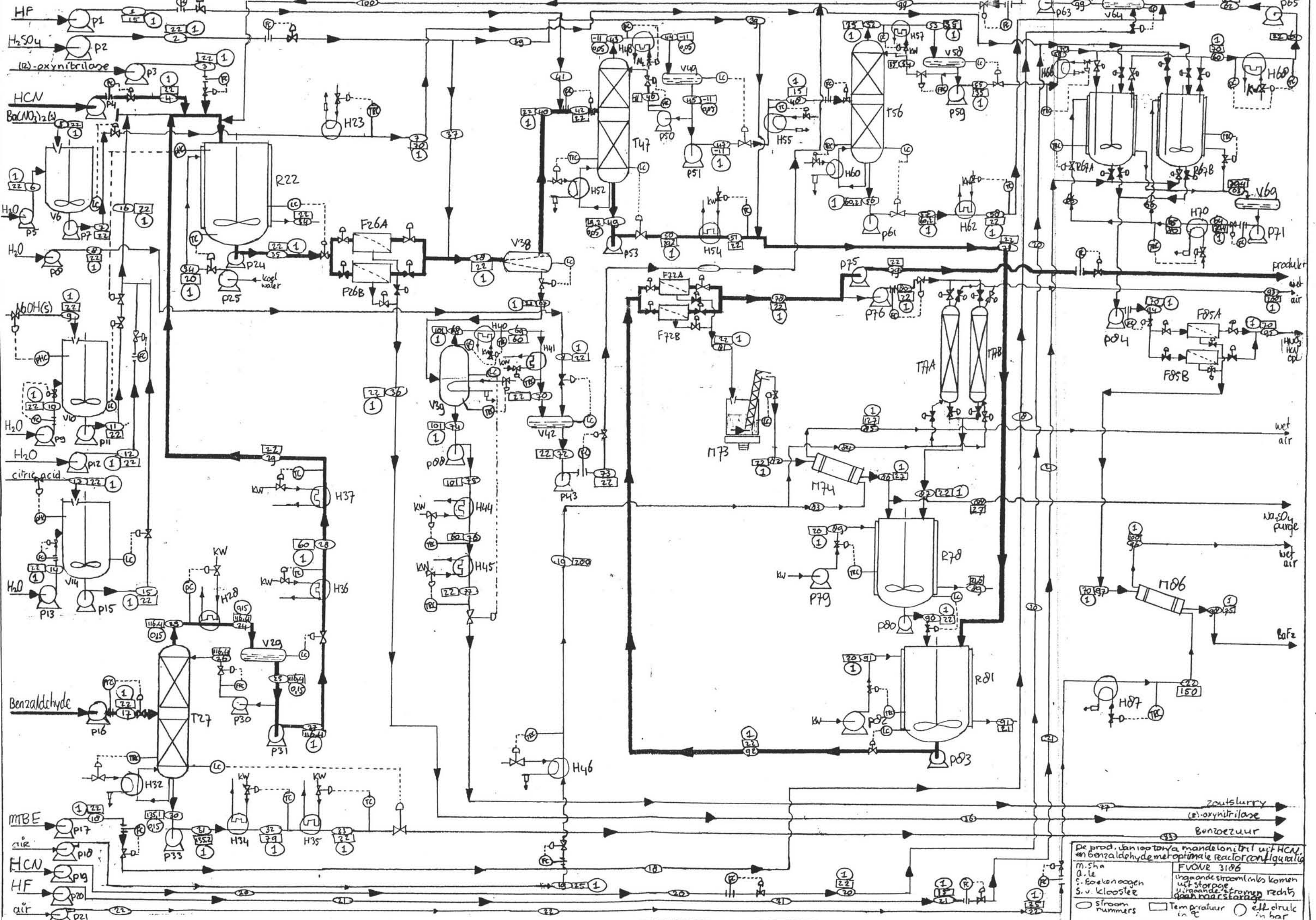
## Bijlage 17E

## Specificatielijsten voor warmtewisselaars

Apparaat nr.	H40	H28	H48	H57
Benaming : Type :	Condensor	Topcondensor	Topcondensor	Topcondensor
Medium - pijpen : - mantel :	water koelwater	benzaldehyde koelwater	MTBE N <sub>2</sub>	MTBE/HCN brine water
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW]:	56.280	1.330	20.230	42.640
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ):	1.501	0.0194	0.9293	1.997
Warmtecapaciteit koelmedium [kJ/kgK]	4.18	4.18	1.04 (N <sub>2</sub> )	4.18
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	750	450	300	400
Abs. druk [bar]: - pijpen : - mantel :	1 1	0.15 1	0.05 1	1 1
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	101/60 20/40	116.4/116.4 20/40	-11/-11 -78/-50	35/35 10/20
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal

## Bijlage 17F      Specificatielijsten voor warmtewisselaars

Apparaat nr.	H32	H52	H60	
Benaming : Type :	Reboiler Forced circulation	Reboiler Forced circulation	Reboiler Thermosyphon	
Medium - pijpen : - mantel :	stoom benzoëzuur	stoom mandelonitril	stoom MTBE	
Capaciteit Uitgewisselde warmte [kW]:	1.797	0.1834	45.440	
Warmtewisselend oppervlak [m <sup>2</sup> ]:	0.04290	0.3857	1.969	
Warmteover- drachtscoëfficiënt [W/m <sup>2</sup> K]	800	650	675	
Warmtecapaciteit stoom [kJ/kgK]	2.29	2.04	2.04	
Abs. druk [bar]: - pijpen : - mantel :	10 0.15	1 0.05	1 1	
Temp. in/uit [°C] - pijpen : - mantel :	220/220 135.1/135.1	100/100 29.2/29.2	100/100 60.2/60.2	
Speciale constructie- materialen	roestvast staal	roestvast staal	roestvast staal	



De prod. van 100 ton/a mandelonitril uit HCN, Benzaldehyde met optimale reactor configuratie.

M. Sha  
 A. Le  
 S. Boeken  
 S. v. Klooster

FVOUR 3106

ingande stroomlijns komen uit storage vervoerd naar rechts op de reactor

○ stroom nummers  
 □ Temperatuur in °C  
 ○ eff. druk in bar





