

Verslag G-Groep 87-1

ONTWERP GLYCOLENFABRIEK

appendices

Laboratorium Apparatenbouw Procesindustrie,
Delft, mei 1987.

Appendix A

DE_BUISREAKTOR.

De buisreaktor wordt berekend door kleine stapjes in de plaats te nemen, waarbij de balansen (differentiaalvergelijkingen) zoals gegeven in 3.2 met behulp van de numerieke Runge Kutta integratie worden berekend. (subroutine RK en subroutine DIFF). De beginvoorwaarden zijn de concentraties en temperatuur uit de warmtewisselaar. In de berekening van de differentiaalvergelijkingen blijken de volumestroom (FV) en de warmtecapaciteit van het mengsel (CP) nodig te zijn. Daar deze continu veranderen, moeten ze steeds opnieuw worden bepaald. dit gebeurt in de subroutine CORR : Met de nieuwe temperatuur wordt de uitzetting van het mengsel bepaald door middel van nieuwe dichtheden van de afzonderlijke componenten. Er wordt een ideaal mengsel aangenomen, zodat de dichtheid van het mengsel bepaald wordt door de afzonderlijke dichtheden naar massafractie op te tellen. De uitzetting veroorzaakt zo een kleine daling van de concentraties van de componenten. De volumestroom wordt groter.

Met dezelfde temperatuur en nieuwe concentraties wordt een nieuwe C_p bepaald. Ook hierbij geldt de aanname van een ideaal mengsel. Tot slot wordt de warmte balans weer kloppend gemaakt, door de temperatuur aan de nieuwe C_p aan te passen :

$$\dot{D}_m * C_{p_{oud}} * T_{oud} = \dot{D}_m * C_{p_{nieuw}} * T$$

$$T = T_{oud} * C_{p_{oud}} / C_{p_{nieuw}}$$

Strikt genomen zou men nu weer van vooraan met deze nieuwe temperatuur moeten corrigeren. De resultaten van één correctie stap blijken echter bevredigend te zijn.

De temperatuursafhankelijke relaties van C_p en ρ van de verschillende componenten staan beschreven in bijlage B. De berekeningen worden beëindigd als de ethyleenoxide 99.99 % geconverteerd is.

Het programma BUISJE.

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7

```

1  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2  COMMON/CONC/F20,EC,EG,DEG,TEG,HEG,T
3  COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
4  COMMON/GEOM/A,TTIJD
5  COMMON/FLUX/PHIMAS,EV,CP
6  COMMON/PRIN/PLAATS,I
7  WRITE (6,*) 'ADIABATISCHE BUISREAKTOR'
8  WRITE (6,*) ' '
9  WRITE (6,*) ' H2O/EO T-IN A DX SI/PR %-
10 &G H2O-RECYCLE'
11 HEAD (5,*) W,I,A,DX,J,EGPRO
12 WRITE (6,91) W,I,A,DX,J,EGPRO
13 91 FORMAT (1X,4 (F9.5,1X),13,1X,F9.2)
14 WRITE (6,*) ' '
15 WRITE (6,*) ' '
16 WRITE (6,*) ' H2C EO EG DEG TEG HEG
17 & T X '
18 WRITE (6,*) ' '
19 EO=97.778
20 H2O=W*97.778
21 EG=19.144
22 DEG=25.477
23 TEG=0
24 HEG=0
25 I=0
26 TTIJD=0
27 PLAATS=0
28 PHIMAS=(EO*44.1+H2C*18+EG*62+DEG*106.1)/1000
29 CALL CORR
30 CALL BUISJE
31 EOO=EO
32 I=I+1
33 CALL RK
34 PLAATS=PLAATS+DX
35 IF (I.EQ.J) CALL BUISJE
36 IF (EO/EOO.GT..0001)GOTO 10
37 CALL BUISJE
38 VTOTR=A*PLAATS
39 WRITE (6,*) ' '
40 WRITE (6,*) 'VTOTR (M**3) TTIJD (S) '
41 WRITE (6,94) VTOTR,TTIJD
42 94 FORMAT (1X,2 (F7.2,4X))
43 77 END

```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....

C DE AANPASSINGEN VAN CONCENTRATIES EN STRCMEN

```

1  SUBROUTINE CCRR
2  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3  COMMON/CONC/F20,EO,EG,DEG,TEG,HEG,T
4  COMMON/FLUX/PHIMAS,EV,CP
5  CPIN=CP
6  VFRH2O=18*H2C*(1+7.2714D-6*(T-273.15)**1.88945)/1000
7  VFREC=44.1*EC*(1+1.61D-3*(T-298.15))/882
8  VFREG=62.1*EG*(1+.62D-3*(T-298.15))/1113
9  VFRDG=106.1*DEG*(1+.64D-3*(T-298.15))/1116
10 VFRTG=150.2*TEG*(1+.69D-3*(T-298.15))/1123
11 VFRHG=194.2*HEG*(1+.74D-3*(T-298.15))/1129
12 VFRTOT=VFRH2C+VFREC+VFREG+VFRDG+VFRTG+VFRHG
13 H2O=H2O/VFRTOT
14 EO=EO/VFRTOT
15 EG=EG/VFRTOT
16 DEG=DEG/VFRTOT
17 TEG=TEG/VFRTOT
18 HEG=HEG/VFRTOT
19 RHO=18*H2O+44.1*EC+62.1*EG+106.1*DEG+150.2*TEG+194.2*HEG
20 RHOCF=18*H2O*4.184+44.1*EO*(2.8233-237.0493/T)+62.1*EG*(6.794
&41-1328.1409/T)+106.1*DEG*(5.05598-856.1206/T)+150.2*TEG*(4.33
&-660.8025/T)+194.2*HEG*(3.346-554.6631/T)
21 CP=RHOCF/RHO*1000
22 EV=PHIMAS/RHC
23 IF (TTIJD.EQ.0) GOTO 15
24 T=T*CPIN/CP
25 15 RETURN
26 END

```

*.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7

C LE RUNGE-KUTTA PROCEDURE

```

1  SUBROUTINE RK
2  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3  COMMON/CONC/P20,EC,EG,DEG,TEG,HEG,T
4  COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
5  P1=EG
6  P2=DEC
7  P3=TEG
8  P4=HEG
9  P11=H2O
10 P12=EO
11 P5=T
12 CALL DIFF
13 Q1=F1
14 Q2=F2
15 Q3=F3
16 Q4=F4
17 Q11=F11
18 Q12=F12
19 Q5=G
20 EG=P1+DX*F1/2
21 DEG=P2+DX*F2/2
22 TEG=P3+DX*F3/2
23 HEG=P4+DX*F4/2
24 H2O=P11+DX*F11/2
25 EO=P12+DX*F12/2
26 T=P5+DX*G/2
27 CALL CORR
28 CALL DIFF
29 Q1=Q1+2*F1
30 Q2=Q2+2*F2
31 Q3=Q3+2*F3
32 Q4=Q4+2*F4
33 Q11=Q11+2*F11
34 Q12=Q12+2*F12
35 Q5=Q5+2*G
36 EG=P1+DX*F1/2
37 DEG=P2+DX*F2/2
38 TEG=P3+DX*F3/2
39 HEG=P4+DX*F4/2
40 H2O=P11+DX*F11/2
41 EO=P12+DX*F12/2
42 T=P5+DX*G/2
43 CALL CORR
44 CALL DIFF
45 Q1=Q1+2*F1
46 Q2=Q2+2*F2
47 Q3=Q3+2*F3
48 Q4=Q4+2*F4
49 Q11=Q11+2*F11
50 Q12=Q12+2*F12
51 Q5=Q5+2*G
52 EG=P1+DX*F1
53 DEG=P2+DX*F2
54 TEG=P3+DX*F3
55 HEG=P4+DX*F4
56 H2O=P11+DX*F11
57 EO=P12+DX*F12
58 T=P5+DX*G
59 CALL CORR
60 CALL DIFF
61 Q1=Q1+F1
62 Q2=Q2+F2
63 Q3=Q3+F3
64 Q4=Q4+F4
65 Q11=Q11+F11
66 Q12=Q12+F12
67 Q5=Q5+G
68 EG=P1+DX*Q1/6
69 DEG=P2+DX*Q2/6
70 TEG=P3+DX*Q3/6
71 HEG=P4+DX*Q4/6
72 H2O=P11+DX*Q11/6
73 EO=P12+DX*Q12/6
74 T=P5+DX*Q5/6
75 CALL CORR
76 RETURN
77 END

```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7

```

1 C FUNCTIE BEREKENINGEN
2 SUBRCUTINE DIFF
3 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
4 COMMON/CONC/P2O,EC,EG,DEG,TEG,HEG,T
5 COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
6 COMMON/GEOM/A,TTIJD
7 COMMON/FLUX/PHIMAS,FV,CP
8 DT=DX*A/FV
9 TTIJD=TTIJD+DT/4
10 V=9.39D5*DEXF(-18134/1.987/T)
11 F1=(H2O-EC)*V*EC*A/FV
12 F2=(EG-DEG)*V*EC*A/FV
13 F3=(DEG-TEG)*V*EO*A/FV
14 F4=TEG*V*EO*A/FV
15 G1=V*EO*H2O*75400
16 G2=V*EO*EG*81800
17 G3=V*EO*DEG*84800
18 G4=V*EO*TEG*86900
19 F11=-H2O*V*EC*A/FV
20 F12=- (H2O+EG+DEG+TEG)*V*EO*A/FV
21 G=(G1+G2+G3+G4)*A*1000/PHIMAS/CP
22 RETURN
    END
  
```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7

```

1 C UITVOER BUISREAKTOR
2 SUBRCUTINE BUISJE
3 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
4 COMMON/CONC/P2O,EC,EG,DEG,TEG,HEG,T
5 COMMON/PRIN/PLAATS,I
6 WRITE(6,96) P2O,EO,EG,DEG,TEG,HEG,T,PLAATS
7 96 FORMAT(07(1X,E8.3),1X,F4.2)
8 I=0
9 RETURN
    END
  
```

ADIABATISCHE BUISREAKTOR

H2O/EC T-IN A DX ST/PR %-E G H2O-RECYCLE
 10.50870 422.80000 1.00000 0.00100 100 2.00

H2O	EO	EG	DEG	TEG	HEG	T	X
.344E+02	.327E+01	.641E+00	.853E+00	.000E+00	.000E+00	.423E+03	0.00
.342E+02	.310E+01	.798E+00	.852E+00	.398E-02	.931E-05	.427E+03	0.10
.340E+02	.290E+01	.978E+00	.851E+00	.859E-02	.436E-04	.431E+03	0.20
.337E+02	.267E+01	.119E+01	.851E+00	.140E-01	.117E-03	.437E+03	0.30
.334E+02	.238E+01	.144E+01	.854E+00	.205E-01	.252E-03	.444E+03	0.40
.330E+02	.204E+01	.174E+01	.860E+00	.285E-01	.487E-03	.452E+03	0.50
.326E+02	.161E+01	.210E+01	.871E+00	.382E-01	.879E-03	.461E+03	0.60
.321E+02	.112E+01	.251E+01	.889E+00	.497E-01	.148E-02	.473E+03	0.70
.316E+02	.629E+00	.291E+01	.913E+00	.613E-01	.225E-02	.484E+03	0.80
.313E+02	.270E+00	.320E+01	.934E+00	.699E-01	.291E-02	.492E+03	0.90
.311E+02	.943E-01	.334E+01	.945E+00	.742E-01	.327E-02	.496E+03	1.00
.311E+02	.297E-01	.339E+01	.950E+00	.758E-01	.340E-02	.497E+03	1.10
.311E+02	.901E-02	.340E+01	.951E+00	.763E-01	.345E-02	.498E+03	1.20
.311E+02	.270E-02	.341E+01	.952E+00	.765E-01	.346E-02	.498E+03	1.30
.311E+02	.807E-03	.341E+01	.952E+00	.765E-01	.347E-02	.498E+03	1.40
.311E+02	.326E-03	.341E+01	.952E+00	.765E-01	.347E-02	.498E+03	1.47

VTOTR(M**3) TTIJD(S)
 1.47 49.01

$\log\left(\frac{v}{v_0} - 1\right)$

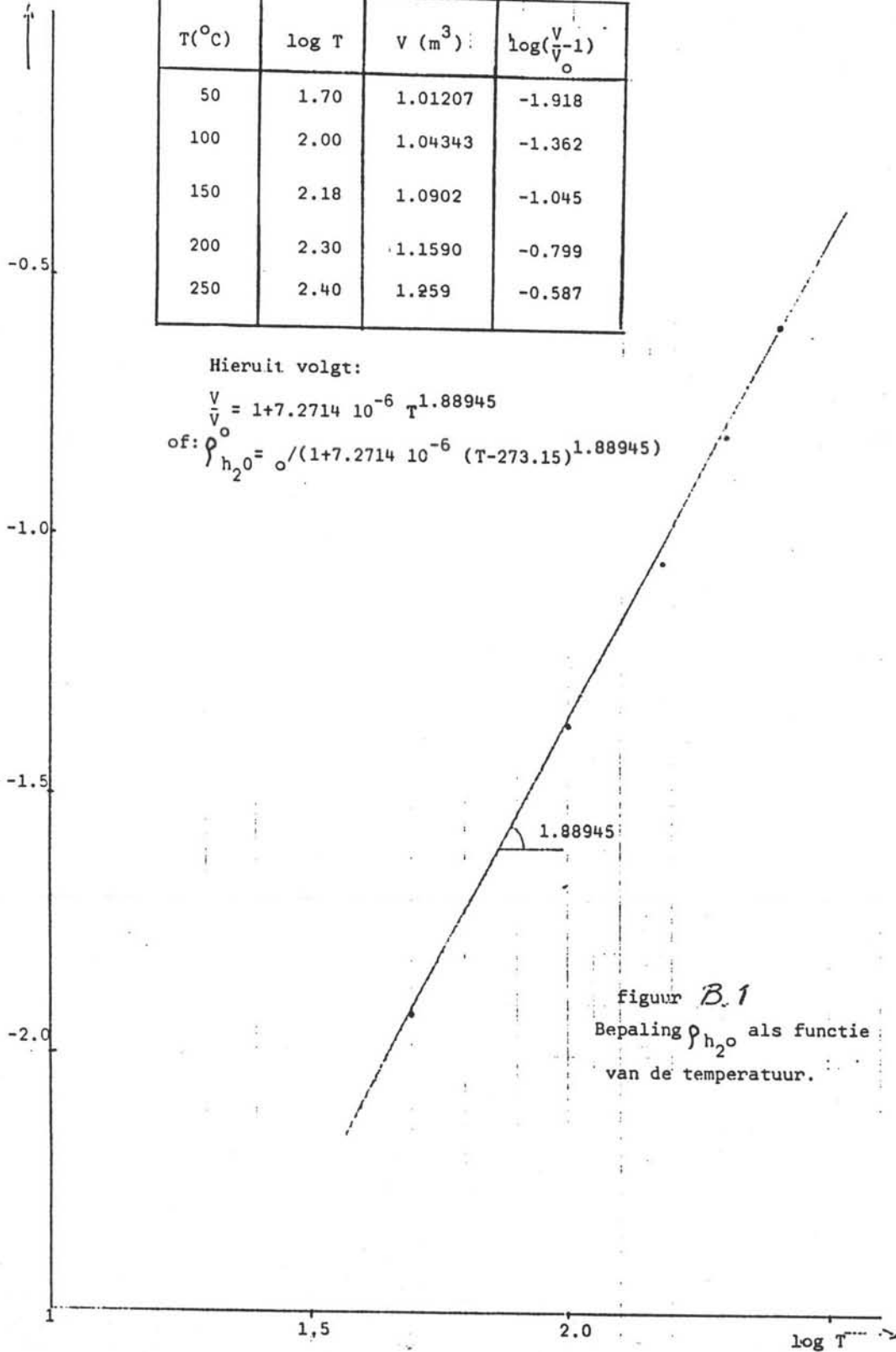
$v_0 = 1.00013$ bij 4°C , $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$

$T(^{\circ}\text{C})$	$\log T$	$v \text{ (m}^3\text{)}$	$\log\left(\frac{v}{v_0} - 1\right)$
50	1.70	1.01207	-1.918
100	2.00	1.04343	-1.362
150	2.18	1.0902	-1.045
200	2.30	1.1590	-0.799
250	2.40	1.259	-0.587

Hieruit volgt:

$$\frac{v}{v_0} = 1 + 7.2714 \cdot 10^{-6} T^{1.88945}$$

of: $\rho_{h_2O} = \rho_0 / (1 + 7.2714 \cdot 10^{-6} (T - 273.15)^{1.88945})$



figuur B.1
Bepaling ρ_{h_2O} als functie
van de temperatuur.

Appendix B

RELATIES VOOR DE WARMTECAPACITEIT EN DICHTHEID.

B.1 Dichtheden.

Het voorverslag [10] gaf de volgende temp. afh. relaties voor de dichtheden (kg/m^3) van de verschillende componenten:

$$\rho_{EO} = 882 / (1 + 1.61 \text{ EE-3} * (T - 298.15)).$$

$$\rho_{MEG} = 1113 / (1 + 0.62 \text{ EE-3} * (T - 298.15)).$$

$$\rho_{DEG} = 1116 / (1 + 0.64 \text{ EE-3} * (T - 298.15)).$$

$$\rho_{TEG} = 1123 / (1 + 0.69 \text{ EE-3} * (T - 298.15)).$$

$$\rho_{HEG} = 1129 / (1 + 0.74 \text{ EE-3} * (T - 298.15)).$$

met T in Kelvin.

Van water werd geen melding gemaakt. De dichtheid van water is wel afhankelijk van de temp [23] We hebben hier zelf een relatie opgesteld: (zie fig. B1)

$$\rho_{H_2O} = 1000 / (1 + 7.27 \text{ EE-6} * (T - 273.15)^{1.88945}).$$

B.2 Warmtecapaciteiten.

Het voorverslag gaf de volgende temperatuurs afhankelijke relaties voor de warmtecapaciteiten (kJ/kgK) van de verschillende componenten:

$$Cp_{EO} = 2.8233 - 237.0483/T$$

$$Cp_{MEG} = 6.79441 - 1328.1409/T$$

$$Cp_{DEG} = 5.05598 - 856.1206/T$$

$$Cp_{TEG} = 4.3358 - 660.8026/T$$

$$Cp_{HEG} = 3.946 - 554.6631/T$$

Ook hier werd geen melding gemaakt van de afhankelijkheid van de C_p van water. Deze blijkt weinig af te hangen van de temperatuur. Daarom werd een konstante waarde van 4.184 (kJ/kgK) gebruikt.

Appendix C

DE REAKTOR IN DE 2-REAKTORENFABRIEK. (PROGRAMMA DUBBEL)

In het programma worden eerst schattingen gemaakt voor de ingangsstromen. De ingangstemperatuur wordt zo gekozen dat de eindtemperatuur 225°C bedraagt.

In subroutine CORR worden deze molenstromen tot concentraties omgewerkt en wordt de buis doorgerekend. De H₂O/EO verhouding wordt dan verhoogd met CRIT. De eerste keer is CRIT nul gesteld. (Over CRIT later meer)

In subroutine BEGIN worden de uitgangskoncentraties weer in molenstromen omgerekend, en daarmee worden de ingangsstromen bepaald. Bij de uitwerking zijn de volgende symbolen gebruikt:

$\Phi_{m,i}$ = molenstroom de reaktor in.
 $\Phi_{m,u}$ = molenstroom de reaktor uit.
 $\Phi_{m,p}$ = molenstroom na de waterafscheiding.

- De EO instroom wordt als volgt berekend:

$$I \quad \Phi_{m,i}EO = \Phi_{mp}MEG + 2 * \Phi_{mp}DEG + 3 * \Phi_{mp}TEG + 4 * \Phi_{mp}HEG + \Phi_{mp}EO$$

$$II \quad \Phi_{mp}DEG + \Phi_{mp}TEG = 5.585$$

$$III \quad \Phi_{mp}MEG = 83.87$$

uit I:

$$\Phi_{m,i}EO = \Phi_{mp}MEG + 3(\Phi_{mp}DEG + \Phi_{mp}TEG) - \Phi_{mp}DEG + 4\Phi_{mp}HEG + \Phi_{mp}EO$$

met II en III:

$$\Phi_{m,i}EO = 83.87 + 3 * 5.585 - \Phi_{mp}TEG + 4 * \Phi_{mp}HEG + \Phi_{mp}EO$$

$$\Phi_{m,i}EO = 100.625 - \Phi_{mp}TEG + 4 * \Phi_{mp}HEG + \Phi_{mp}EO$$

- $\Phi_{m,i}H_2O = W * \Phi_{m,i}EO$
- $MEG = \Phi_{m,u}H_2O * 2\% / (100-2)\%$

(volgt uit $\bar{\phi}_{I_{m0}} \text{MEG} = 0.02 (\bar{\phi}_{I_{m0}} \text{H2O} + \bar{\phi}_{I_{m0}} \text{MEG})$)

- $\bar{\phi}_{I_{m,i}} \text{DEG} = 0$
- $\bar{\phi}_{I_{m,i}} \text{TEG} = 0$
- $\bar{\phi}_{I_{m,i}} \text{HEG} = 0$

Verder wordt de massastroom opnieuw berekend.

Dan wordt CRIT berekend:

$$\text{CRIT} = \frac{(\bar{\phi}_{I_{mp}} \text{DEG} + \bar{\phi}_{I_{mp}} \text{TEG})_{\text{moment}}}{\bar{\phi}_{I_{mp}} \text{DEG} + \bar{\phi}_{I_{mp}} \text{TEG}} - 5.585 \cdot (\bar{\phi}_{I_{mp}} \text{DEG} + \bar{\phi}_{I_{mp}} \text{TEG})_{\text{gewenst}}$$

Dan begint de buisberekening weer, en wordt W met CRIT verhoogd. Dit herhaalt zich tot CRIT klein genoeg is. Alleen het hoofdprogramma en subroutine BEGIN zijn bijgevoegd, de rest van de subroutines zijn identiek aan die in het programma Buisje.

De belangrijke delen van het programma DUBBEL
en enige resultaten van de iteratie.

```

*.....*.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7
1      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2      COMMON/CONC/P20,EC,EG,DEG,TEG,HEG,T
3      COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
4      COMMON/GEOM/A,TTIJD
5      COMMON/FLUX/FHIMAS,FV,CP
6      COMMON/PRIN/PLAATS,I
7      COMMON/FMOL/FMEO,FMH2O,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG,W,EGPRO
8      WRITE (6,*) 'ADIABATISCHE BUISREAKTOR'
9      WRITE (6,*) ' '
10     WRITE (6,*) ' P20/EO          T-IN          A          DX          %-EC H2O-RE
      ECLE'
11     READ (5,*) W,10,A,DX,EGPRO
12     WRITE (6,91) W,10,A,DX,EGPRO
13     91  FORMAT (2X,5(F7.3,4X))
14     WRITE (6,*) ' '
15     WRITE (6,*) '      H2C          EO          T(K)      EG      DEG          TEG          HEG
      &
16     WRITE (6,*) ' '
17     EO=97.35
18     H2O=W*97.35
19     EG=(W-1)*EGPRO/(100-EGPRO)*97.35
20     DEG=0
21     TEG=0
22     HEG=0
23     FHIMAS=(EO*44.1+H2C*18+EG*62.1)/1000
24     NR=0
25     CRIT=0
26     05  NR=NR+1
27     WRITE (6,90) NR
28     90  FORMAT (1X,'ITERATIESTAPNUMMER:',I3)
29     WRITE (6,98) H2C,EC,EG,DEG,TEG,HEG
30     98  FORMAT (6(1X,F8.3),' : MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)')
31     I=0
32     T=TO
33     TTIJD=0
34     PLAATS=0
35     CALL CORR
36     CALL EUISJE
37     EO=EO
38     10  I=I+1
39     CALL RK
40     PLAATS=PLAATS+DX
41     IF (EO/EO0.GT..0001) GOTO 10
42     CALL EUISJE
43     W=W+CRIT
44     CALL BEGIN
45     WRITE (6,99) FMH2C,FMEO,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG
46     99  FORMAT (6(1X,F8.3),' : MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)')
47     CRIT=FMDG+FMTG-5.585
48     WRITE (6,97) W,CRIT
49     97  FORMAT (1X,'H2O/EO: ',F7.4,'      CRITERIUM: ',F7.4)
50     WRITE (6,*) ' '
51     IF (ABS(CRIT).GT.1E-4) GOTO 05
52     WRITE (6,*) ' '
53     VTOTR=PLAATS*A
54     WRITE (6,*) 'VTCTR (M**3) TTIJD (S) '
55     WRITE (6,92) VTCTR,TTIJD
56     92  FORMAT (2(1X,F07.2,4X))
57     END

```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....

```

1 C BEPALING INSGANGSSTROMEN
2 SUBROUTINE BEGIN
3 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
4 COMMON/COMC/F20,EO,EG,DEG,TEG,HEG,T
5 COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
6 COMMON/FLUX/FHIMAS,FV,CP
7 COMMON/FMOL/FMEC,FMH2O,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG,W,EGPRO
8 FMH2O=FV*H2O*1000
9 FMEC=FV*EO*1000
10 FMEG=FV*EG*1000
11 FMDG=FV*DEG*1000
12 FMTG=FV*TEG*1000
13 FMHG=FV*HEG*1000
14 EO=97.35+FMEC+4*FMHG-FMDG+3.273
15 H2O=W*EO
16 EG=FMH2O*EGFRC/(100-EGPRC)
17 DEG=0
18 TEG=0
19 HEG=0
20 FHIMAS=(EO*44.1+H2O*18+EG*62.1+DEG*106.1)/1000
21 RETURN
    END
  
```

ADIABATISCHE LUISFAKTOR

H2O/EO	T-IN	A	DX	%-EG	H2O-RECYCLE	T(K) PLATS (
11.000	420.000	0.500	C.010		2.000		
H2O	EO	EG	DEG	TEG	HEG		
ITERATIE STAPNUMMER: 1							
1070.850	97.350	19.867	0.000	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)	
.382E+02	.347E+01	.709E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00	
.344E+02	.342E-03	.371E+01	.194E+00	.662E-02	.170E-03	: CONCENTRATIES (MOL/L) 498.60 2.60	
979.446	0.010	105.582	5.522	0.188	0.005	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)	
H2O/EO: 11.0000	CRITERIUM: 0.1255						
ITERATIE STAPNUMMER: 2							
1051.256	95.250	19.869	0.000	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)	
.382E+02	.344E+01	.714E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00	
.344E+02	.327E-03	.371E+01	.193E+00	.658E-02	.172E-03	: CONCENTRATIES (MOL/L) 498.35 2.60	
961.622	0.009	103.500	5.401	0.184	0.005	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)	
H2O/EO: 11.0367	CRITERIUM: -0.0001						
ITERATIE STAPNUMMER: 18							
1051.244	95.250	19.629	0.000	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)	
.382E+02	.346E+01	.714E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00	
.344E+02	.326E-03	.371E+01	.193E+00	.658E-02	.169E-03	: CONCENTRATIES (MOL/L) 498.36 2.60	
961.808	0.009	103.500	5.401	0.184	0.005	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)	
H2O/EO: 11.0366	CRITERIUM: -0.0001						

VTOTR(M**3) TIJD(S)
1.31 47.34

Appendix D

DE REAKTOR IN DE 1-REAKTORFABRIEK. (PROGRAMMA ENKEL)

Het programma werkt analoog aan programma dubbel. Eerst worden beginschattingen van de H₂O- en DEG recycle gedaan. Dan wordt na het doorrekenen van de buis in subroutine BEGIN de concentraties weer in molenstromen omgerekend, en worden de nieuwe ingangsstromen als volgt berekend:

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ MEG} = \bar{\phi}_{mu} \text{ MEG} - 83.87$$

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ DEG} = \bar{\phi}_{mu} \text{ DEG} - 3.273$$

Deze stromen worden met een factor $(2.312 / \bar{\phi}_{mu} \text{ TEG})$ vermenigvuldigd om het iteratie proces te versnellen.

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ EO} = \bar{\phi}_{mp} \text{ MEG} + 2 * \bar{\phi}_{mp} \text{ DEG} + 3 * \bar{\phi}_{mp} \text{ TEG} + 4 * \bar{\phi}_{mp} \text{ HEG} + \bar{\phi}_{mp} \text{ EO}$$

$$\bar{\phi}_{mp} \text{ MEG} + 2 * \bar{\phi}_{mp} \text{ DEG} + 3 * \bar{\phi}_{mp} \text{ TEG} = 97.35 \quad \text{====>}$$

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ EO} = 97.35 + 4 * \bar{\phi}_{mp} \text{ HEG} + \bar{\phi}_{mp} \text{ EO}$$

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ TEG} = 0$$

$$\bar{\phi}_{mi} \text{ HEG} = 0$$

De berekening van de buis begint dan weer. Komt eenmaal 2.312 mol/s TEG uit de buis, (CRIT1 = TG - 2.312 < FOUT) dan wordt gekeken in hoeverre de berekend MEG recycle verschilt van de meegevoerde MEG stroom met de waterrecycle. (CRIT2 = H₂O * 2/98 - MEG) De waterrecycle wordt nu met dit verschil gedeeld door 10 vermeerderd, en de berekening van de DEG recycle begint weer. (W = W + CRIT2/10) Dit gaat door tot het verschil kleiner dan FOUT (0.01 in het begin) wordt. FOUT wordt dan door 10 gedeeld, en de hele iteratie begint weer.

Het programma ENKEL is evenals DUBBEL gedeeltelijk bijgevoegd.

De belangrijke delen van het programma ENKEL,
en enige resultaten van de iteratie.

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....*

```

1      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2      COMMON/CONC/F20,FO,EG,DEG,TEG,HEG,T
3      COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
4      COMMON/GEOM/A,TTIJD
5      COMMON/FLUX/FHIMAS,FV,CP
6      COMMON/PRIN/PLAATS,I
7      COMMON/FMOL/FMEC,FMH2O,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG,U,EGPRO
8      WRITE (5,*) 'ADIABATISCHE BUISREAKTOR'
9      WRITE (5,*) ' '
10     WRITE (6,*) ' H2O/EO          T-IN          A          DG          %-EG
11     &IN H2O-RECYCLE '
12     READ (5,*) W,T0,A,DX,EGPRO
13     WRITE (5,91) W,T0,A,DX,EGPRO
14     91  FORMAT (2X,5(F7.3,4X))
15     WRITE (6,*) ' H2C          EO          EG          DEG          TEG          HEG
16     & WRITE (6,*) ' '
17     EO=97.35
18     H2O=W*97.35
19     EG=(W-1)*EGPRO/(100-EGPRO)*97.35
20     DEG=24
21     TEG=0
22     HEG=0
23     FOUT=.01
24     NR2=0
25     02  PHIMAS=(EO*44.1+H2O*18+EG*62.1+DEG*106.1)/1000
26     NR1=0
27     NR2=NR2+1
28     WRITE (6,88) NR2
29     88  FORMAT (1X,'ITERATIE 2, NUMMER:',I3)
30     WRITE (5,*) ' '
31     05  NR1=NR1+1
32     WRITE (6,90) NR1
33     90  FORMAT (1X,'ITERATIE 1, NUMMER:',I3)
34     WRITE (6,98) H2O,EG,EG,DEG,TEG,HEG
35     98  FORMAT (5(1X,F8.3),', ' : MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S) '
36     I=0
37     T=T0
38     TTIJD=0
39     PLAATS=0
40     CALL CORR
41     CALL BUISJE
42     EOO=EO
43     10  I=I+1
44     CALL RK
45     PLAATS=PLAATS+DX
46     IF (EO/EOO.GT..0001) GOTO 10
47     CALL BUISJE
48     CALL PEGIN
49     WRITE (5,99) FMH2O,FMEO,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG
50     99  FORMAT (5(1X,F8.3),', ' : MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S) '
51     DEGREC=FMDG-3.273
52     CRIT1=FMTG-2.312
53     WRITE (6,97) CRIT1,DEGREC
54     97  FORMAT (1X,'CRITERIUM 1: ',F7.4,/,', ' DEG-RECYCLE: ',F7.4)
55     WRITE (5,*) ' '
56     IF (ABS(CRIT1).GT.FOUT) GOTO 05
57     WRITE (5,*) ' '
58     CRIT2=FMH2O*2/98-EG
59     WRITE (6,89) CRIT2,W
60     89  FORMAT (1X,'CRITERIUM 2: ',F7.4,/,', ' H2O/EO          : ',F7.4)
61     W=W+CRIT2/10
62     WRITE (6,*) ' '
63     WRITE (6,*) ' '
64     IF (ABS(CRIT2).GT.FOUT) GOTO 2
65     FOUT=FOUT/10
66     IF (FOUT.GT..0001) GOTO 2
67     WRITE (6,*) ' '
68     VTCTR=PLAATS*A
69     WRITE (5,*) 'VTCTR(M**3) TTIJD(S) '
70     WRITE (6,92) VTCTR,TTIJD
71     92  FORMAT (2(1X,F07.2,4X))
72     END

```

C REEVALUERING INGANGSSTROMEN

```

1 SUBROUTINE BEGIN
2 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3 COMMON/CONC/H2O,EO,EG,DEG,TEG,HEG,T
4 COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,G,F11,F12,DX
5 COMMON/FLUX/FHIMAS,FV,CP
6 COMMON/FMOL/FMEC,FMH2O,FMEG,FMDG,FMTG,FMHG,W,EGPRO
7 FMH2O=FV*H2O*1000
8 FMEC=FV*EO*1000
9 FMEG=FV*EG*1000
10 FMDG=FV*DEG*1000
11 FMTG=FV*TEG*1000
12 FMHG=FV*HEG*1000
13 EO=97.35+FMEC+4*FMHG
14 H2O=W*EO
15 EG=(FMEG-83.27)*(2.312/FMTG)
16 DEG=(FMDG-3.273)*(2.312/FMTG)
17 TEG=0
18 HEG=0
19 FHIMAS=(EO*44.1+H2C*18+EG*62.1+DEG*106.1)/1000
20 RETURN
21 END
    
```

ADIABATISCHE EUISTRUKTOR

H2O/EO	T-IN	A	DC	%-EG IN H2O-RECYCLE		
11.000	420.000	0.500	0.010	2.000		
H2O	EO	EG	DEG	TEG	HEG	T (K) PLAATS (T)
ITERATIE 2, NUMMER: 1						
ITERATIE 1, NUMMER: 1						
1070.850	97.350	19.867	24.000	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.351E+02	.319E+01	.652E+00	.787E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.318E+02	.317E-03	.337E+01	.886E+00	.681E-01	.295E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 492.85 3.51
981.325	0.010	103.901	27.325	2.099	0.091	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: -0.2131						
DEG-RECYCLE: 24.0521						
ITERATIE 1, NUMMER: 2						
1074.954	97.723	22.064	26.494	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.347E+02	.315E+01	.712E+00	.855E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.315E+02	.314E-03	.338E+01	.951E+00	.734E-01	.317E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 492.00 3.61
985.432	0.010	105.934	29.774	2.297	0.099	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: -0.0151						
DEG-RECYCLE: 26.5007						
ITERATIE 1, NUMMER: 3						
1075.325	97.757	22.208	26.675	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.347E+02	.315E+01	.716E+00	.860E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.314E+02	.302E-03	.338E+01	.955E+00	.737E-01	.318E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 491.94 3.70
985.795	0.009	106.075	29.951	2.311	0.100	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: -0.0008						
DEG-RECYCLE: 26.6775						
CRITERIUM 2: -2.0937						
H2O/EO : 11.0000						

ITERATIE 2, NUMMER: 39

ITERATIE 1, NUMMER: 1						
1027.576	97.778	19.150	25.480	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.345E+02	.328E+01	.643E+00	.856E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.311E+02	.317E-03	.342E+01	.955E+00	.768E-01	.348E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 495.20 3.3
938.041	0.010	103.020	28.754	2.312	0.105	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: 0.0002						
DEG-RECYCLE: 25.4608						
ITERATIE 1, NUMMER: 2						
1027.524	97.778	19.148	25.478	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.345E+02	.328E+01	.643E+00	.856E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.311E+02	.316E-03	.342E+01	.955E+00	.768E-01	.348E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 495.20 3.3
937.988	0.010	103.017	28.752	2.312	0.105	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: 0.0002						
DEG-RECYCLE: 25.4794						
ITERATIE 1, NUMMER: 3						
1027.524	97.778	19.145	25.477	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.345E+02	.328E+01	.643E+00	.856E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.311E+02	.316E-03	.342E+01	.955E+00	.768E-01	.348E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 495.20 3.3
937.987	0.010	103.014	28.751	2.312	0.105	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: 0.0001						
DEG-RECYCLE: 25.4780						
ITERATIE 1, NUMMER: 4						
1027.524	97.778	19.144	25.477	0.000	0.000	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR IN (MOL/S)
.345E+02	.328E+01	.643E+00	.856E+00	.000E+00	.000E+00	: CONCENTRATIES (MOL/L) 420.00 0.00
.311E+02	.316E-03	.342E+01	.955E+00	.768E-01	.348E-02	: CONCENTRATIES (MOL/L) 495.20 3.3
937.987	0.010	103.013	28.751	2.312	0.105	: MOLENSTROMEN DE REAKTOR UIT (MOL/S)
CRITERIUM 1: 0.0001						
DEG-RECYCLE: 25.4777						
CRITERIUM 2: 0.0000						
H2O/EO : 10.5087						

Appendix E

PROGRAMMA INTERNE WARMTE WISSELENDE REAKTOR (WWREAC).

De optredende reacties zijn gelijk aan die in de buisreaktor. Er is hier sprake van twee stromen die in tegenstroom warmte wisselen.

De differentiaal in de heengaande sectie zijn identiek aan die in de adiabatische buis, alleen in de warmte differentiaal komt er een uitwisselingsterm bij (n.b: h betekent heen).

$$\begin{aligned} d(H_2O(h))/dx &= -r(H_2O(h)) * A/\Phi_v \\ d(EO(h))/dx &= -r(EO(h)) * A/\Phi_v \\ d(MEG(h))/dx &= r(MEG(h)) * A/\Phi_v \\ d(DEG(h))/dx &= r(DEG(h)) * A/\Phi_v \\ d(TEG(h))/dx &= r(TEG(h)) * A/\Phi_v \\ d(HEG(h))/dx &= r(HEG(h)) * A/\Phi_v \end{aligned}$$

$$Temp(h)/dx = \left[\sum_{i=1}^4 r_i * \Delta H_i * A(h) + \{T(\text{terug}) - T(h)\} * UAW/L \right] / \Phi_m / C_p(h)$$

In de teruggaande sectie draaien alle differentiaal van teken om, omdat ze tegengesteld is. Slechts de warmte overdrachts term blijft gelijk (t betekent terug)

$$\begin{aligned} d(H_2O(t))/dx &= r(H_2O(t)) * A/\Phi_v \\ d(EO(t))/dx &= r(EO(t)) * A/\Phi_v \\ d(MEG(t))/dx &= -r(MEG(t)) * A/\Phi_v \\ d(DEG(t))/dx &= -r(DEG(t)) * A/\Phi_v \\ d(TEG(t))/dx &= -r(TEG(t)) * A/\Phi_v \\ d(HEG(t))/dx &= -r(HEG(t)) * A/\Phi_v \end{aligned}$$

$$Temp(t)/dx = \left[\sum_{i=1}^4 r_i * \Delta H_i * A(t) + \{T(t) - T(h)\} * UAW/L \right] / \Phi_m / C_p(t)$$

Bij het oplossen van deze differentiaal is er een randvoorwaarde probleem, aangezien de uitgaande concentraties niet bekend zijn. Ook de concentratie bij L is niet bekend. Bij de bespreking van de buis is al vermeld dat uitgang concentraties allen van de ingangconcentraties afhangen. Door voorafgaand aan de w.w. een buis met de gewenste ingang concentraties te berekenen, zijn de uitgang concentraties van de w.w. bekend. Deze zijn identiek aan die uit de buis. Bij gelijke ingang temp. is de uitgang temp. van de buis ook gelijk aan die van de w.w. aangezien de adiabatische temp. stijging konstant blijft.

Bij $x = 0$ zijn nu dus alle randvoorwaarden bekend. Door nu ook een $A(h)$, $A(t)$ en UAW/L te definiëren, kan L berekend worden. Dit is namelijk de plaats waar de concentraties en temperaturen van de heen- en teruggaande stromen identiek zijn.

In het programma wordt de ingangs temp. gevarieerd, totdat $T_{max} = 225$ C.

De belangrijke delen van het programma WWREAC.

De correctie- en integratiesubroutines zijn 2 keer zo groot als in het programma BUISJE, maar zijn verder niet wezenlijk veranderd.

Enige resultaten zijn eveneens afgedrukt.

```

*.....*...1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.*
1      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2      COMMON/CONC/P2OH,H2OT,EOH,EOT,EGH,EGT,DGH,DGT,TGH,TGT,HGH,HGT,TH,T
3      &T
4      COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,GH,F6,F7,F8,F9,GT,F11,F12,F13,F14,DX
5      COMMON/GEOM/AH,AT,UAWL,TTIJDH,TTIJD
6      COMMON/FLUX/PHIMAS,FVH,FVT,CPH,CPT
7      COMMON/PRIN/PLAATS,I
8      WRITE (6,*) 'ADIABATISCHE BUISREAKTOR'
9      WRITE (6,*) 'H2O/EO      T-IN      A      DX      ST/PR
10     %EG-RECYCLIE'
11     READ (5,*) W,T0,AH,DX,J,EGPRO
12     READ (5,*) AP,AT,UAWL,DX,J
13     WRITE (6,91) W,T0,AH,DX,J,EGPRO
14     91  FORMAT (1X,4(1X,F7.3,3X),1X,I3,9X,F7.3)
15     WRITE (6,*) 'H2C      EO      EG      DEG      TEG      HEG
16     WRITE (6,*) 'X'
17     T
18     TH=T0
19     H2OH=W*95.25
20     EOH=95.25
21     EGH=19.627
22     DGH=0
23     TGH=0
24     HGH=0
25     TT=400
26     H2OT=40
27     EOT=0
28     EGT=4
29     TGT=.4
30     HGT=.04
31     PHIMAS=(EOH*44.1+H2OH*18+EGH*62.1+DGH*106.1)/1000
32     I=0
33     UAWL=0
34     TTIJDH=0
35     TTIJD=0
36     PLAATS=0
37     CALL RHOCF
38     CALL BUISJE
39     EOO=EOH
40     I=I+1
41     CALL RK
42     PLAATS=PLAATS+DX
43     C  IF (I.EQ.J) CALL BUISJE
44     IF (EOH/EOO.C1.0.0001) GOTO 10
45     CALL BUISJE
46     VTOTR=AH*PLAATS
47     WRITE (6,*) 'VTOTR(M**3) TTIJD(S)'
     WRITE (6,*) 'VTCTR,TTIJDH

```

```

48 92 FORMAT (2 (1X, F7.2, 4X))
49 WRITE (6, *) ' : '
50 WRITE (6, *) ' : '
51 WRITE (6, *) ' : '
52 WRITE (6, *) ' : '
53 WRITE (6, *) ' : '
54 WRITE (6, *) 'INTERNE WARMTEWISSELINGS-REAKTOR'
55 WRITE (6, *) ' : '
56 UAWL=UAWLO
57 WRITE (6, *) ' AH AT UAW/L DX ST/P
58 93 FORMAT (1X, 4 (F9.3, 1X), 7X, I3)
59 WRITE (6, *) ' H2CH EOH EGT EGH DGT TGT TGH HGT
60 WRITE (6, *) ' TH P2OT EOT EGT DGT TGT HGT
61 & TT X '
62 WRITE (6, *) ' '
63 TT=TH
64 EOH=EOH
65 H2OH=H2OH
66 EGT=EGH
67 DGT=DCH
68 TGT=TGH
69 HGT=HCH
70 TH=T0
71 H2OH=W*95.25
72 EOH=95.25
73 EGH=19.627
74 DGH=0
75 TGH=0
76 HGH=0
77 l=0
78 TTIJDH=0
79 TTIJDT=0
80 PLAATS=0
81 CALL RHOCF
82 CALL WWUIT
83 ITMAX=TT
84 20 I=I+1
85 TTO=TT
86 CALL RK
87 IF (TT.GT.TTC) ITMAX=TT
88 PLAATS=PLAATS+DX
89 IF (I.EQ.J) CALL WWUIT
90 IF (EOH.GT.EC1) GOTO 20
91 CALL WWUIT
92 VTOTR=(AH+AT)*PLAATS
93 TTIJD=TTIJDH+TTIJDT
94 WRITE (6, *) ' : '
95 WRITE (6, *) 'VTCTR (M*#3) TTIJD (S) '
96 WRITE (6, 94) VTCTR, TTIJD
97 94 FORMAT (1X, 2 (F7.2, 4X))
98 IF (ABS(TTMAX-498).GT.0.1) THEN
99 TO=TO-(TTMAX-498)
100 GOTO 25
101 ELSE
102 WRITE (6, *) 'ITERATIE VOLTOOID'
103 END IF
104 15 END

```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.*

C FUNCTIE BEREKENINGEN

```

1 SUBROUTINE DIFF
2 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3 COMMON/CONC/P2OH,H2OT,EOH,EOT,EGH,EGT,DGH,DGT,TGH,TGT,HGH,HGT,TH,TT
4 ET
5 COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,GH,F6,F7,F8,F9,GT,F11,F12,F13,F14,DX
6 COMMON/GEOM/AH,AT,UAWL,TTIJDH,TTIJD
7 COMMON/FLUX/PHIMAS,FVH,FVT,CPH,CPT
8 DTH=DX*AH/FVP
9 DTT=DX*AT/FVT
10 TTIJDR=TTIJD+DTH/4
11 TTIJDT=TTIJD+DTT/4
12 VH=9.39D5*DEXP(-18134/1.987/TH)
13 VT=9.39D5*DEXP(-18134/1.987/TT)
14 F1=(H2OH-EGH)*VH*ECH*AH/FVH
15 F2=(EGH-DGH)*VH*ECH*AH/FVH
16 F3=(DGH-TGH)*VH*ECH*AH/FVH
17 F4=TGH*VH*EOT*AH/FVH
18 G1=VH*EOH*H2CH*79400
19 G2=VH*EOH*EGP*81800
20 G3=VH*EOH*DGP*84800
21 G4=VH*EOH*TGP*86900
22 F11=-H2OH*VH*EOH*AH/FVH
23 F12=- (H2OH+EGH+DGH+TGH)*VH*EOH*AH/FVH
24 GH=(G1+G2+G3+G4)*AH*1000+(TT-TH)*UAWL/PHIMAS/CPH
25 F6=- (H2OT-EOT)*VT*ECT*AT/FVT
26 F7=- (EGT-DGT)*VT*ECT*AT/FVT
27 F8=- (EOT-TGT)*VT*ECT*AT/FVT
28 F9=-TCT*VT*ECT*AT/FVT
29 G6=VT*EOT*H2CI*79400
30 G7=VT*EOT*EGT*81800
31 G8=VT*EOT*DGT*84800
32 G9=VT*EOT*TGT*86900
33 F13=H2OT*VT*ECT*AT/FVT
34 F14=(H2OT+EGT+DGT+TGT)*VT*EOT*AT/FVT
35 GT=(-(G5+G7+G8+G9)*AT*1000+(TT-TH)*UAWL)/PHIMAS/CPT
36 RETURN
    END
  
```

H2O	EO	EG	DEG	IEG	HEG	T	X
.383E+02	.347E+01	.715E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	.418E+03	0.000
.345E+02	.346E-03	.372E+01	.194E+00	.660E-02	.169E-03	.496E+03	2.843

VTOTR(M**3) TTIJD(S)
 1.42 51.30

INTERNE WARMTEWISSELINGS-RFAKTOR

AH	AT	UAW/L	DX	ST/PR			
0.500	0.500	5000.000	0.001	200			
H2OH	EOH	EGH	DGH	TGH	HGH	TH	
.383E+02	.347E+01	.715E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	.418E+03	
.381E+02	.330E+01	.874E+00	.341E-02	.707E-05	.997E-08	.423E+03	
.378E+02	.309E+01	.107E+01	.847E-02	.377E-04	.116E-06	.426E+03	
.374E+02	.282E+01	.130E+01	.162E-01	.117E-03	.598E-06	.435E+03	
.370E+02	.249E+01	.160E+01	.282E-01	.300E-03	.229E-05	.443E+03	
.365E+02	.206E+01	.198E+01	.475E-01	.708E-03	.766E-05	.454E+03	
.359E+02	.150E+01	.247E+01	.785E-01	.159E-02	.237E-04	.467E+03	
.355E+02	.117E+01	.275E+01	.998E-01	.233E-02	.402E-04	.474E+03	
H2OT	EOT	EGT	DGT	TGT	HGT	TT	X
.345E+02	.346E-03	.372E+01	.194E+00	.660E-02	.169E-03	.496E+03	0.00
.345E+02	.135E-02	.371E+01	.194E+00	.659E-02	.169E-03	.497E+03	0.20
.345E+02	.541E-02	.371E+01	.193E+00	.656E-02	.168E-03	.498E+03	0.40
.345E+02	.222E-01	.369E+01	.191E+00	.648E-02	.165E-03	.498E+03	0.60
.345E+02	.904E-01	.363E+01	.185E+00	.615E-02	.154E-03	.497E+03	0.80
.345E+02	.904E-01	.363E+01	.185E+00	.615E-02	.154E-03	.497E+03	1.00
.347E+02	.325E+00	.344E+01	.165E+00	.511E-02	.119E-03	.492E+03	1.20
.352E+02	.842E+00	.302E+01	.123E+00	.324E-02	.635E-04	.461E+03	1.20
.356E+02	.117E+01	.274E+01	.995E-01	.231E-02	.399E-04	.474E+03	1.30

VTOTR(M**3) TTIJD(S)
 1.30 46.37
 ITERATIE VOLTOOID

Appendix F

PROGRAMMA: BEREKENING VAN HETEROGEEN GEKATALYSEERDE PROPSTROOMREAKTOR

De omzetting kan niet eenvoudig worden berekend met een enkelvoudige integratie van een propstroom reaktor, omdat de deaktiverende katalysator met gebonden glycolen een niet-stationaire toestand oplevert. Daarom werd gekozen voor een tanks-in-serie model, welke in zijn geheel over de tijd wordt geïntegreerd. De massabalans over een tankje geeft:

TRANSPORT = - OMZETTING - OPHOPING

voor EO: $\Phi_v^*(EO) - \Phi_v^*(EO)_{in} = -r_{EO} * V - V * d(EO)/dt$
 waarin: Φ_v = volumestroom (m^3/s)
 (EO) = heersende conc. EO in ideaal gemengd tankje
 $(EO)_{in}$ = ingaande conc. = uitgaande conc. (vorige tank)
 V = volume tankje
 r = omzettingssnelheid EO

Omgeschreven met $\tau = \Phi_v/V$ (verblijftijd) wordt dit:

$$d(EO)/dt = -r_{EO} + ((EO)_{in} - (EO))/\tau$$

Analoog geldt voor MEG; SE1; SE2; SE3 en H^+

$$d(MEG)/dt = r_{MEG} + ((MEG) - (MEG))/\tau$$

$$d(SE1)/dt = r_{SE1}$$

$$d(SE2)/dt = r_{SE2}$$

$$d(SE3)/dt = r_{SE3}$$

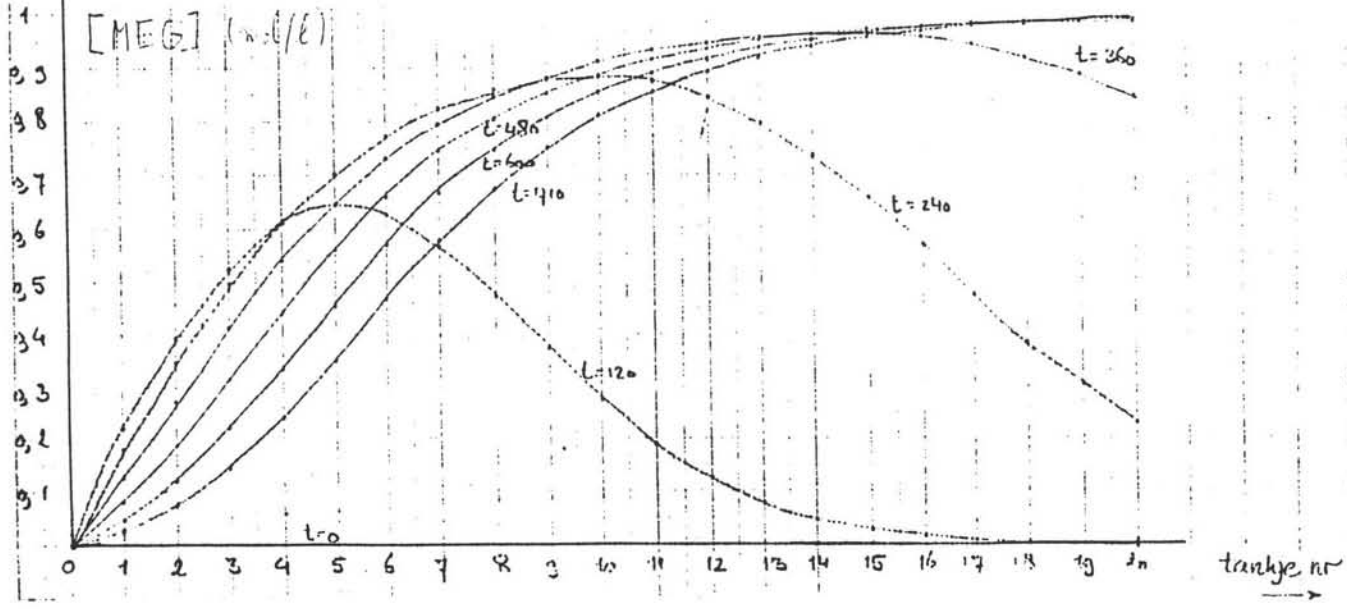
$$d(H^+)/dt = -r_{H^+}$$

Voor de verschillende omzettingssnelheden geldt [10] :

$$-r_{EO} = k_1 * (EO) * (H^+) + k_3 * (EO) * (H^+)^2 + k_4 * (EO) * (H^+) * (SE1) + k_5 * (EO) * (H^+) * (SE2)$$

$$r_{MEG} = k_2 * (EO) * (H^+)$$

$$r_{SE1} = k_3 * (EO) * (H^+)^2 - k_4 * (EO) * (H^+) * (SE1)$$



Figuur F.1 MEG concentratie als functie van plaats en tijd.

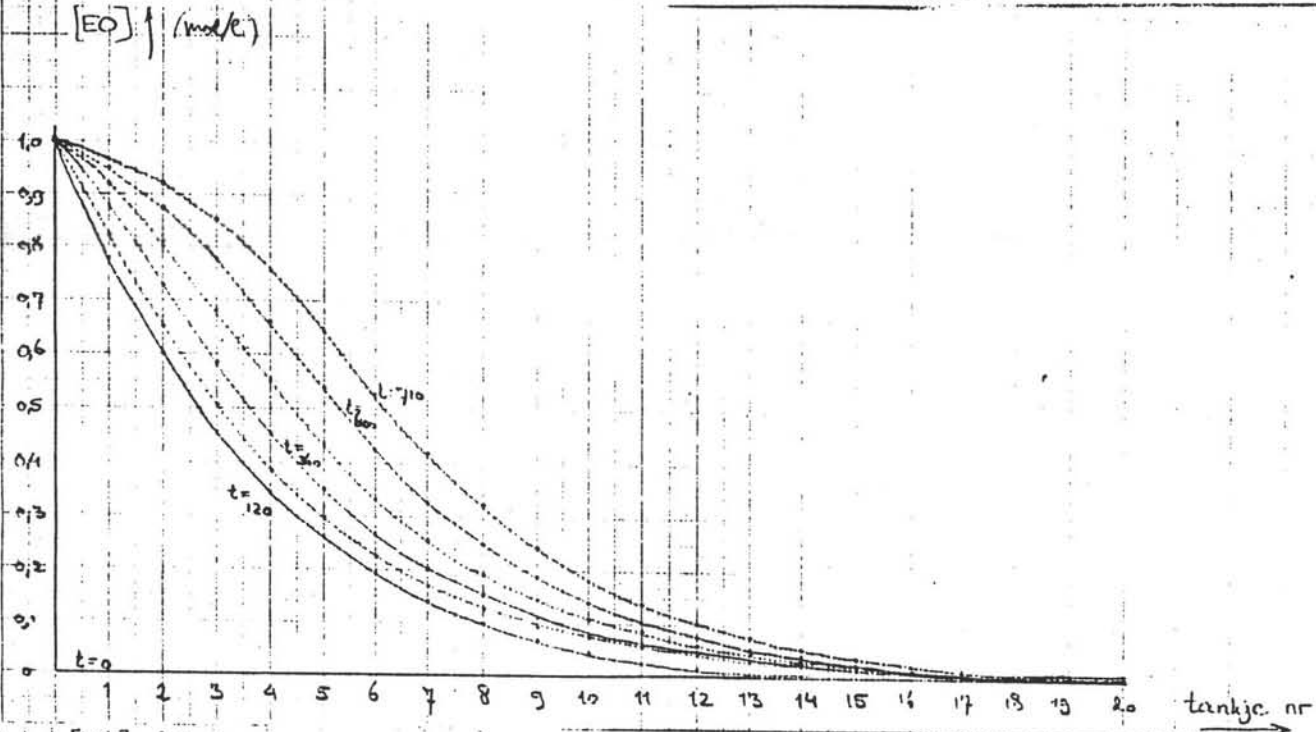


Fig. F.2 EO concentratie als functie van plaats en tijd.

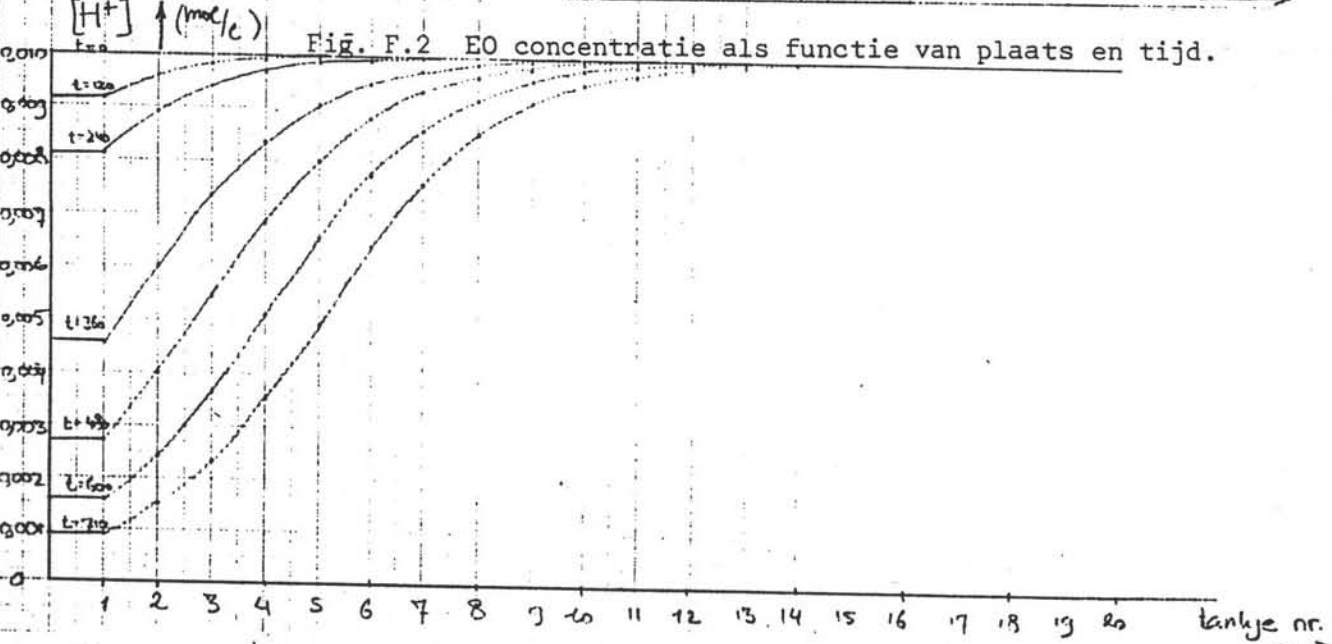


Fig. F.3 H^+ concentratie als functie van plaats en tijd.

$$r_{SE2} = k_4 * (EO) * (H^+) * (SE1) - k_5 * (EO) * (H^+) * (SE2)$$

$$r_{SE3} = k_5 * (EO) * (H^+) * (SE2)$$

$$r_{H^+} = k_d * (EO) * (H^+) * \{(SE1) + (SE2) + (SE3)\}$$

Met een lewatis SPC 118 sulfonzuurionenwisselaar met deeltjes van $dp = 0.38$ mm. gelden de volgende reactie snelheids constanten:

$$k_2 = 1.3 \text{ EE } 10 * \exp(-13700/RT)$$

$$k_3 = 0.3 * k_2$$

$$k_4 = 0.6 * k_3$$

$$k_5 = 1.5 * k_4$$

$$k_d = 70 \text{ EE } 9 * \exp(-14400/RT)$$

$$\text{met } R = 1.987 \text{ (cal/molK)}.$$

Het programma is als volgt ingericht:

Vanaf tijdstip $t = 0$ wordt de gehele "buis" (20 tankjes in serie) van voor tot achter doorgerekend. Per tankje worden de veranderde concentraties in de ophopingstermen van de massabalansen in de matrix BU opgeslagen. Dan wordt het volgende tijdstip $t = t + dt$ doorgerekend, waarbij de oude concentraties uit de matrix per tankje worden veranderd.

De berekening wordt beëindigd als er uit het laatste tankje een uitgaande ethyleenoxide concentratie van 1% van die van de ingaande concentratie is.

F.1 Uitwerking heterogeen gekatalyseerde reaktor.

Onder gunstige omstandigheden is het verloop van de concentraties in plaats en tijd bij de heterogeen gekatalyseerde reaktor bepaald. (zie ook paragraaf 3.8)

Omstandigheden:

$$\tau = 300 \text{ s.}$$

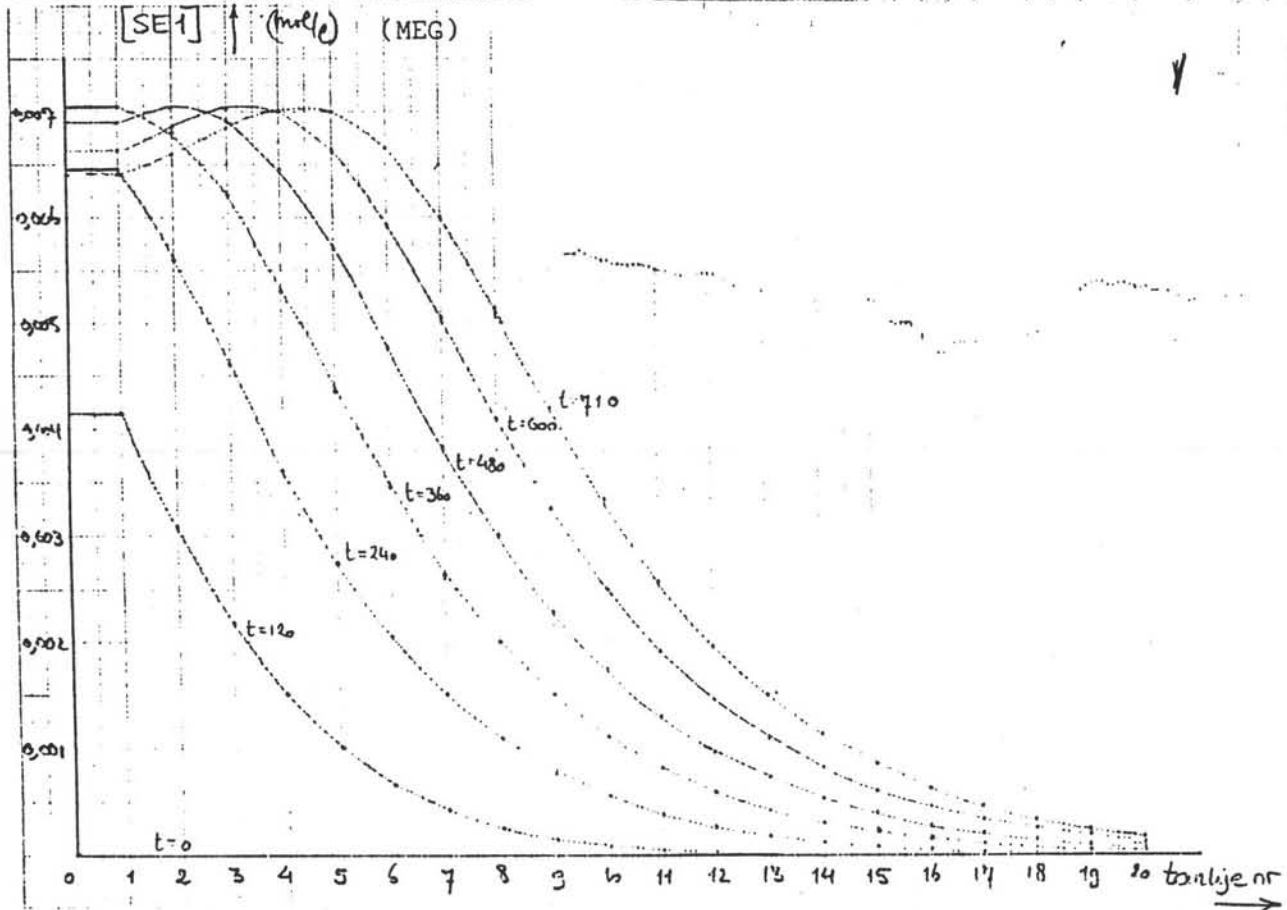
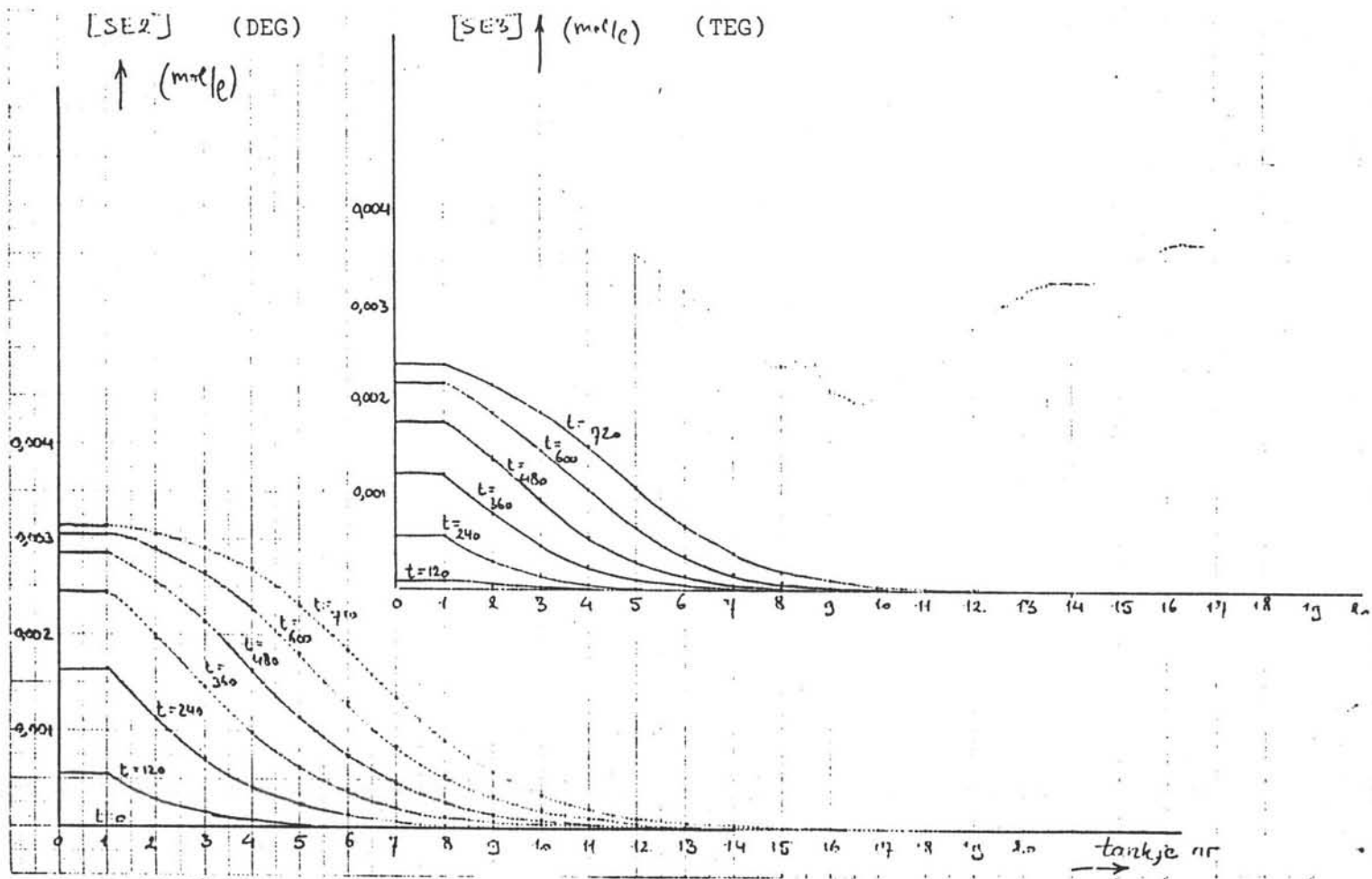
20 tanks in serie...propstroommodel.

$$\text{isotherme reaktor : } T = 100^\circ\text{C}$$

$$pH, \text{initieel} = 2$$

$$\text{Ingaande concentratie EO: } 1 \text{ mol/l}$$

De waterstofionen concentratie blijkt snel af te nemen in het begin van de reaktor, oftewel waar de grootste omzetting is.



Figuur F.4 -F.6 Gebonden MEG, DEG en TEG als functie van plaats en tijd.

De EO concentratie neemt steeds langzamer af naar het eind van de reaktor. Bovendien blijkt de deactiverende katalysator aan het begin van de reaktor te zorgen voor een steeds kleinere initiële omzettings snelheid. Het front is niet scherp. Om dit wel te realiseren moet de reaktiesnelheid sterk verhoogd worden (temp.verhoging) en een betere propstroom gerealiseerd worden.

De MEG produktie is aan het begin van de reaktor hoog, zodat het concentratie profiel over de reaktor op $t < \tau$ een duidelijk maximum vertoont. Dit maximum verdwijnt naarmate er meer verblijftijd is verstreken en het MEG op hoge concentratie uit de reaktor stroomt.

De produktie aan de ingang van de reaktor wordt steeds lager, door afnemende katalysator aktiviteit. De produktie van gebonden glycolen is laag en aan het eind van de reaktor zelfs nihil. De selektiviteit voor de produktie van MEG is dan ook hoog (ongeveer 95.2%).

Belangrijke delen van het programma HETERO.

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....*

```
1      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2      DIMENSION BU(100,6)
3      COMMON/CONC/EO,EOIN,EG,EGIN,SE1,SE2,SE3,HP
4      COMMON/KAAS/V2,V3,V4,V5,VD
5      COMMON/FUNK/F1,F2,F3,F4,F5,F6
6      COMMON/TIME/TIJD,DT,TAU,I,N,K
7      READ (5,*) ECG,T0,HP0,TAU,DT,J,N
8      WRITE (6,1) ECG,T0,HP0,TAU,DT,J,N
9      1  FORMAT (10,1) EO-IN (MCL/L) =, E9.3/, T(0) (K)
      & PLUS (C) (MOL/L) =, E9.3/, VERBLIJFTIJD(S) =, F7.2,/, STAPJE Rk (S)
      & =, F6.4,/, AANTAL TANKS =, I2)
10     WRITE (6,*)
11     WRITE (6,*) EC TANKNR EG SE1 SE2 SE3
      & HP TIJD TANKNR EG SE1 SE2 SE3
12     DO 70 K=1,N
13     BU(K,1)=0
14     EO=0
15     BU(K,2)=0
16     EG=0
17     BU(K,3)=0
18     SE1=0
19     BU(K,4)=0
20     SE2=0
21     BU(K,5)=0
22     SE3=0
23     BU(K,6)=HP0
24     HP=HP0
25     70 CONTINUE
26     V2=1.3D10*DEXP(-13700/1.987/T0)/60
27     V3=.3*V2
28     V4=.6*V3
29     V5=1.5*V4
30     VD=7D9*DEXP(-14400/1.987/T0)/60
31     K=0
32     I=0
33     L=0
34     TIJD=0
35     CALL TANKJE
36     11 I=I+1
37     EOIN=EO
38     EGIN=0
39     DO 71 K=1,N
40     EO=BU(K,1)
41     EG=BU(K,2)
42     SE1=BU(K,3)
43     SE2=BU(K,4)
44     SE3=BU(K,5)
45     HP=BU(K,6)
46     L=L+1
47     CALL RK
48     IF ((I.EQ.J).AND.(L.EQ.10)) CALL TANKJE
49
50     BU(K,1)=EO
51     BU(K,2)=EG
52     BU(K,3)=SE1
53     BU(K,4)=SE2
54     BU(K,5)=SE3
55     BU(K,6)=HP
56     EOIN=EO
57     EGIN=EG
58     71 CONTINUE
59     TIJD=TIJD+DT
60     IF (EC/EO0.LT.0.01) GOTO 11
61     CALL TANKJE
62     SE1TOT=0
63     SE2TOT=0
64     SE3TOT=0
65     EGVRIJ=0
66     FOOVER=0
67     DO 72 K=1,N
68     SE1TCT=SE1TOT+BU(K,3)/N
69     SE2TCT=SE2TOT+BU(K,4)/N
70     SE3TCT=SE3TOT+BU(K,5)/N
71     EO=BU(K,1)
72     EG=BU(K,2)
73     SE1=BU(K,3)
74     SE2=BU(K,4)
75     SE3=BU(K,5)
76     HP=BU(K,6)
77     CALL TANKJE
78     72 CONTINUE
79     WRITE (6,*) EC-KAT DEG-KAT TEG-KAT
80     WRITE (6,4) SE1TCT,SE2TOT,SE3TOT
81     FORMAT (3,1Y,EP,3,1Y)
```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....*

C DIFFERENTIAAL VERGELIJKINGEN

```
1 SUBROUTINE HE1FEC
2 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3 COMMON/CONC/EC,ECIN,EG,ECIN,SE1,SE2,SE3,HP
4 COMMON/KAAS/V2,V3,V4,V5,VD
5 COMMON/FUNK/F1,F2,F3,F4,F5,F6
6 COMMON/TIME/TIJD,D1,TAU,I,N,K
7 IF (HP.LT.1D-7) THEN
8 F1=0
9 F2=0
10 F3=0
11 F4=0
12 F5=(EOIN-EO)/TAU*N
13 F6=(ECIN-EG)/TAU*N
14 ELSE
15 F1=V3*HP**2*EC-V4*HP*EO*SE1
16 F2=V4*HP*EO*SE1-V5*HP*EO*SE2
17 F3=V5*HP*EO*SE2
18 F4=-VD*HP*EO*(SE1+SE2+SE3)
19 F5=-V2*HP*EO-V3*HP**2*EO-V4*HP*EC*SE1-V5*HP*EO*SE2+(EOIN-EO)
20 &/TAU*N
21 F6=V2*HP*EO+(ECIN-EG)/TAU*N
22 END IF
23 RETURN
END
```

..........1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.....*

C UITVOER HETEROGENE KATALYSE IN TANK

```
1 SUBROUTINE TANKJE
2 IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
3 COMMON/CONC/EC,EOIN,EG,ECIN,SE1,SE2,SE3,HP
4 COMMON/TIME/TIJD,D1,TAU,I,N,K
5 WRITE (6,2) EC,EC,SE1,SE2,SE3,HP,TIJD,K
6 2 FORMAT (6(2X,E9.3),1X,F9.2,2X,I2)
7 IF (K.EQ.N) I=0
8 I=0
9 RETURN
10 END
11
```

FO-IN (MCL/L) = 1.100E+01
 T (O) (K) = 3.373E+03
 F PLUS (C) (MOL/L) = 6.100E-01
 VEHLI (L) (S) = 300.00
 STATJE (K) (S) = 1.0000
 PARTIAL TANKS = 24

FO	EG	SF1	SE2	SE3	HP	TIJD	TANKN
0.100E-01	0.987E+00	0.184E-02	0.101E-02	0.255E-02	0.100E-01	858.00	1
0.998E+00	0.174E+00	0.611E-02	0.211E-02	0.257E-02	0.282E-03	858.00	2
0.994E+00	0.370E+00	0.611E-02	0.111E-02	0.255E-02	0.314E-03	858.00	3
0.999E+00	0.593E+00	0.622E-02	0.220E-02	0.255E-02	0.349E-03	858.00	4
0.989E+00	0.836E+00	0.622E-02	0.320E-02	0.255E-02	0.389E-03	858.00	5
0.986E+00	1.111E+00	0.622E-02	0.419E-02	0.255E-02	0.432E-03	858.00	6
0.982E+00	1.422E+00	0.622E-02	0.519E-02	0.255E-02	0.480E-03	858.00	7
0.982E+00	1.761E+00	0.622E-02	0.619E-02	0.248E-02	0.534E-03	858.00	8
0.979E+00	2.144E+00	0.633E-02	0.719E-02	0.246E-02	0.593E-03	858.00	9
0.977E+00	2.577E+00	0.633E-02	0.819E-02	0.244E-02	0.658E-03	858.00	10
0.966E+00	3.060E+00	0.633E-02	0.919E-02	0.242E-02	0.730E-03	858.00	11
0.955E+00	3.566E+00	0.644E-02	0.101E-01	0.236E-02	0.809E-03	858.00	12
0.952E+00	4.111E+00	0.644E-02	0.111E-01	0.233E-02	0.897E-03	858.00	13
0.949E+00	4.777E+00	0.644E-02	0.121E-01	0.229E-02	0.993E-03	858.00	14
0.942E+00	5.477E+00	0.655E-02	0.131E-01	0.225E-02	0.110E-02	858.00	15
0.937E+00	6.244E+00	0.655E-02	0.141E-01	0.221E-02	0.121E-02	858.00	16
0.929E+00	7.033E+00	0.666E-02	0.151E-01	0.216E-02	0.134E-02	858.00	17
0.922E+00	7.833E+00	0.666E-02	0.161E-01	0.211E-02	0.148E-02	858.00	18
0.919E+00	8.633E+00	0.677E-02	0.171E-01	0.206E-02	0.163E-02	858.00	19
0.917E+00	9.433E+00	0.677E-02	0.181E-01	0.200E-02	0.179E-02	858.00	20
0.911E+00	1.026E+01	0.688E-02	0.191E-01	0.194E-02	0.197E-02	858.00	21
0.909E+00	1.111E+01	0.688E-02	0.201E-01	0.187E-02	0.216E-02	858.00	22
0.845E+00	1.199E+01	0.688E-02	0.211E-01	0.180E-02	0.235E-02	858.00	23
0.829E+00	1.299E+01	0.699E-02	0.221E-01	0.173E-02	0.254E-02	858.00	24
0.814E+00	1.406E+01	0.699E-02	0.231E-01	0.165E-02	0.273E-02	858.00	25
0.794E+00	1.511E+01	0.709E-02	0.241E-01	0.157E-02	0.292E-02	858.00	26
0.774E+00	1.622E+01	0.709E-02	0.251E-01	0.149E-02	0.311E-02	858.00	27
0.754E+00	1.733E+01	0.709E-02	0.261E-01	0.140E-02	0.330E-02	858.00	28
0.734E+00	1.844E+01	0.709E-02	0.271E-01	0.131E-02	0.349E-02	858.00	29
0.711E+00	1.955E+01	0.709E-02	0.281E-01	0.122E-02	0.368E-02	858.00	30
0.689E+00	2.066E+01	0.699E-02	0.291E-01	0.113E-02	0.387E-02	858.00	31
0.684E+00	2.177E+01	0.699E-02	0.301E-01	0.105E-02	0.406E-02	858.00	32
0.647E+00	2.288E+01	0.699E-02	0.311E-01	0.958E-03	0.425E-02	858.00	33
0.617E+00	2.399E+01	0.688E-02	0.321E-01	0.872E-03	0.444E-02	858.00	34
0.593E+00	2.511E+01	0.688E-02	0.331E-01	0.790E-03	0.463E-02	858.00	35
0.568E+00	2.622E+01	0.677E-02	0.341E-01	0.711E-03	0.482E-02	858.00	36
0.543E+00	2.733E+01	0.666E-02	0.351E-01	0.636E-03	0.501E-02	858.00	37
0.519E+00	2.844E+01	0.666E-02	0.361E-01	0.566E-03	0.520E-02	858.00	38
0.495E+00	2.955E+01	0.666E-02	0.371E-01	0.500E-03	0.539E-02	858.00	39
0.471E+00	3.066E+01	0.610E-02	0.381E-01	0.440E-03	0.558E-02	858.00	40
0.447E+00	3.177E+01	0.610E-02	0.391E-01	0.385E-03	0.577E-02	858.00	41
0.424E+00	3.288E+01	0.610E-02	0.401E-01	0.335E-03	0.596E-02	858.00	42
0.402E+00	3.399E+01	0.554E-02	0.411E-01	0.290E-03	0.615E-02	858.00	43
0.380E+00	3.511E+01	0.554E-02	0.421E-01	0.250E-03	0.634E-02	858.00	44
0.359E+00	3.622E+01	0.554E-02	0.431E-01	0.215E-03	0.653E-02	858.00	45
0.333E+00	3.733E+01	0.483E-02	0.441E-01	0.184E-03	0.672E-02	858.00	46
0.320E+00	3.844E+01	0.483E-02	0.451E-01	0.156E-03	0.691E-02	858.00	47
0.301E+00	3.955E+01	0.442E-02	0.461E-01	0.133E-03	0.710E-02	858.00	48
0.282E+00	4.066E+01	0.442E-02	0.471E-01	0.112E-03	0.729E-02	858.00	49
0.262E+00	4.177E+01	0.401E-02	0.481E-01	0.994E-04	0.748E-02	858.00	50
0.251E+00	4.288E+01	0.401E-02	0.491E-01	0.879E-04	0.767E-02	858.00	51
0.236E+00	4.399E+01	0.362E-02	0.501E-01	0.797E-04	0.786E-02	858.00	52
0.221E+00	4.511E+01	0.362E-02	0.511E-01	0.669E-04	0.805E-02	858.00	53
0.208E+00	4.622E+01	0.334E-02	0.521E-01	0.560E-04	0.824E-02	858.00	54
0.193E+00	4.733E+01	0.334E-02	0.531E-01	0.468E-04	0.843E-02	858.00	55
0.181E+00	4.844E+01	0.325E-02	0.541E-01	0.390E-04	0.862E-02	858.00	56
0.169E+00	4.955E+01	0.307E-02	0.551E-01	0.325E-04	0.881E-02	858.00	57
0.151E+00	5.066E+01	0.291E-02	0.561E-01	0.270E-04	0.900E-02	858.00	58
0.141E+00	5.177E+01	0.274E-02	0.571E-01	0.224E-04	0.919E-02	858.00	59
0.132E+00	5.288E+01	0.259E-02	0.581E-01	0.186E-04	0.938E-02	858.00	60
0.124E+00	5.399E+01	0.244E-02	0.591E-01	0.154E-04	0.957E-02	858.00	61
0.116E+00	5.511E+01	0.236E-02	0.601E-01	0.127E-04	0.976E-02	858.00	62
0.109E+00	5.622E+01	0.236E-02	0.611E-01	0.105E-04	0.995E-02	858.00	63
0.102E+00	5.733E+01	0.192E-02	0.621E-01	0.867E-05	0.101E-01	858.00	64
0.095E+00	5.844E+01	0.180E-02	0.631E-01	0.736E-05	0.102E-01	858.00	65
0.094E+00	5.955E+01	0.169E-02	0.641E-01	0.590E-05	0.103E-01	858.00	66
0.094E+00	6.066E+01	0.159E-02	0.651E-01	0.486E-05	0.104E-01	858.00	67
0.093E+00	6.177E+01	0.150E-02	0.661E-01	0.400E-05	0.105E-01	858.00	68
0.093E+00	6.288E+01	0.140E-02	0.671E-01	0.329E-05	0.106E-01	858.00	69
0.093E+00	6.399E+01	0.132E-02	0.681E-01	0.271E-05	0.107E-01	858.00	70
0.093E+00	6.511E+01	0.124E-02	0.691E-01	0.223E-05	0.108E-01	858.00	71
0.093E+00	6.622E+01	0.116E-02	0.701E-01	0.183E-05	0.109E-01	858.00	72
0.093E+00	6.733E+01	0.116E-02	0.711E-01	0.150E-05	0.110E-01	858.00	73
0.093E+00	6.844E+01	0.116E-02	0.721E-01	0.123E-05	0.111E-01	858.00	74
0.093E+00	6.955E+01	0.102E-02	0.731E-01	0.101E-05	0.112E-01	858.00	75
0.093E+00	7.066E+01	0.995E-03	0.741E-01	0.831E-06	0.113E-01	858.00	76
0.093E+00	7.177E+01	0.896E-03	0.751E-01	0.682E-06	0.114E-01	858.00	77
0.093E+00	7.288E+01	0.840E-03	0.761E-01	0.559E-06	0.115E-01	858.00	78
0.093E+00	7.399E+01	0.787E-03	0.771E-01	0.458E-06	0.116E-01	858.00	79
0.093E+00	7.511E+01	0.737E-03	0.781E-01	0.376E-06	0.117E-01	858.00	80
0.093E+00	7.622E+01	0.691E-03	0.791E-01	0.308E-06	0.118E-01	858.00	81
0.093E+00	7.733E+01	0.647E-03	0.801E-01	0.253E-06	0.119E-01	858.00	82
0.093E+00	7.844E+01	0.606E-03	0.811E-01	0.207E-06	0.120E-01	858.00	83
0.093E+00	7.955E+01	0.567E-03	0.821E-01	0.170E-06	0.121E-01	858.00	84
0.093E+00	8.066E+01	0.531E-03	0.831E-01	0.139E-06	0.122E-01	858.00	85
0.093E+00	8.177E+01	0.497E-03	0.841E-01	0.114E-06	0.123E-01	858.00	86
0.093E+00	8.288E+01	0.466E-03	0.851E-01	0.932E-07	0.124E-01	858.00	87
0.093E+00	8.399E+01	0.438E-03	0.861E-01	0.763E-07	0.125E-01	858.00	88
0.093E+00	8.511E+01	0.408E-03	0.871E-01	0.625E-07	0.126E-01	858.00	89
0.093E+00	8.622E+01	0.380E-03	0.881E-01	0.511E-07	0.127E-01	858.00	90
0.093E+00	8.733E+01	0.357E-03	0.891E-01	0.419E-07	0.128E-01	858.00	91
0.093E+00	8.844E+01	0.334E-03	0.901E-01	0.343E-07	0.129E-01	858.00	92
0.093E+00	8.955E+01	0.313E-03	0.911E-01	0.280E-07	0.130E-01	858.00	93
0.093E+00	9.066E+01	0.293E-03	0.921E-01	0.230E-07	0.131E-01	858.00	94
0.093E+00	9.177E+01	0.274E-03	0.931E-01	0.188E-07	0.132E-01	858.00	95
0.093E+00	9.288E+01	0.256E-03	0.941E-01	0.154E-07	0.133E-01	858.00	96
0.093E+00	9.399E+01	0.240E-03	0.951E-01	0.126E-07	0.134E-01	858.00	97
0.093E+00	9.511E+01	0.224E-03	0.961E-01	0.103E-07	0.135E-01	858.00	98
0.093E+00	9.622E+01	0.210E-03	0.971E-01	0.842E-08	0.136E-01	858.00	99
0.093E+00	9.733E+01	0.196E-03	0.981E-01	0.689E-08	0.137E-01	858.00	100
0.093E+00	9.844E+01	0.184E-03	0.991E-01	0.564E-08	0.138E-01	858.00	101

FC-KAT DEC-K31 TEC-KAT
 382E-02 .124E-01 .735E-03

MESSAGE SUMMARY: MESSAGE NUMBER - CCUNT

Appendix G

POMPEN

Er worden verschillende pompen gebruikt om de stromen op 30 bar te brengen. De formules waarmee gewerkt worden zijn:

$$H_{man} = \frac{P}{\rho * g} ; g = 9.8 \text{ m/s.}$$

vermogen = $g * H_{man} * m / n$ kW.
n = 0.8 voor een- en 0.7 voor meertrapscentrifugaalpompen

POMP 1 EO

De EO moet gepompt worden van 3 naar 30 bar.

$$H_{man} = 315 \text{ m.}$$

$$V = 4.8 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s.}$$

We gebruiken hiervoor een meertraps centrifugaal pomp.

$$P = 21 \text{ kW.}$$

POMP 2 H2Orecycle

Recycle waterstroom moet van 5 bar gepompt worden naar 30 bar.

$$H_{man} = 284 \text{ m.}$$

$$V = 3.8 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s.}$$

We gebruiken hiervoor een meertraps centrifugaal pomp.

$$P = 13.6 \text{ kW.}$$

POMP 3 H2Orec.

Recycle waterstroom moet van 2.47 bar gebracht worden op 3.8 bar

$$H_{man} = 14.4 \text{ m.}$$

$$V = 4.5 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s}.$$

Hiervoor gebruiken we een eentraps centrifugaal pomp.

$$P = 0.753 \text{ kW}.$$

POMP 4 H₂Orec.

Waterstroom moet op 3.8 bar worden gebracht.

$$H_{\text{man}} = 29.4 \text{ m}.$$

$$V = 5 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s}.$$

Hiervoor gebruiken we een eentraps centrifugaal pomp.

$$P = 1.76 \text{ kW}.$$

POMP 5 H₂Orec

De waterstroom moet op 3.8 bar gebracht worden.

$$H_{\text{man}} = 38 \text{ m}.$$

$$V = 5.7 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s}.$$

We gebruiken een eentraps centrifugaal pomp.

$$P = 2.64 \text{ kW}.$$

POMP 6 H₂Orec.

De stroom moet op 3.8 bar gebracht worden.

$$H_{\text{man}} = 36 \text{ m}.$$

$$V = 0.23 \text{ EE } -3 \text{ m}^3/\text{s}.$$

We gebruiken een eentraps centrifugaal pomp.

$$P = 0.10 \text{ kW}.$$

POMP 7 H₂O + Recycle stromen.

De gezamenlijke stroom moet van 3.8 op 30 bar gebracht worden.

$$H_{\text{man}} = 284.4 \text{ m}.$$

$$V = 1.88 \text{ EE } -2 \text{ m}^3/\text{s}.$$

We gebruiken een meerstraps centrifugaal pomp.

$$P = 49.3 \text{ kW}.$$

Totaal vermogen is dus 89.1 kW.

Appendix H
BIJLAGE MIXER.

Mixer uitgerekend met SULZER PROCESS EQUIPMENT

We kiezen de Sulzer pakking type SMV[34] Die is geschikt voor laag viskeuze vloeistoffen in een turbulent regime. De standaard deviatie sigma: is een maat voor de menging. Voor een goede homogeniteit is vereist dat:

$$\frac{\sigma}{\bar{x}} = 0.01$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{x}_i - \bar{x})^2}{n-1}}$$

$$x = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n}$$

$$= \frac{\sqrt{\dot{V}_1 \cdot \dot{V}_2}}{\dot{V}_1 + \dot{V}_2} = \sqrt{\bar{x} (1-\bar{x})} \quad ; \quad \text{met} \quad \bar{x} = \frac{\dot{V}_1}{\dot{V}_1 + \dot{V}_2}$$

\dot{V}_2 = water (+ glycol) totaal
 \dot{V}_1 = E.O.

EO = 95.25 mol/s molmassa E.O. = 44.05
 = 4.195 kg/s rho = 875 kg/m³
 V = 4.795 · 10³ m³/s = 17.3 m³/Hr

H2O = 1051 mol/s = 19 kg/s
 V = 72.92 kg/s (water + M.E.G.)

$$x = \frac{17.3}{72.92 + 17.3} = 0.197$$

$$G_0 = 0.03937 \quad \frac{G}{G_0} \text{ ---} = 0.01 \Rightarrow \nabla = 0.004$$

$$\frac{G}{x} = \frac{0.004}{0.19} = 0.0204$$

m.b.v. fig. 12.3 uit de Sulzer handleiding halen we dat er 4 mixing elements nodig zijn. De diameter van de pijp = 0.1463 m De lengte van de Sulzer mixer = 4*D = 0.582 m.

BEREKENING DRUKVAL.

$$P = Ne * v * L/D.$$

$$Ne = 3.1 ; \quad = 944.15 ; \quad v = 1.464 \text{ m}^3/\text{s} ; \quad L/D = 4$$

$$P = 3.1 * 944.15 * 1.464 * 4 = 0.25 \text{ bar.}$$

Appendix I

BEREKENING WARMTEWISSELAAR.

Het mengsel heeft een temp van 92°C. Om het voldoende snel te laten reageren brengen we het op 147°C. Daarvoor berekenen we m.b.v. het dictaat apparaten bouw voor de proces ind. een warmtewisselaar die het mengsel van 90°C op 147°C brengt.

De energie die daarvoor nodig is, is:

$$Q = C_p * \Delta T * \dot{m} = 5592.5 \text{ kJ.}$$

We hebben de beschikking over :

- Lage druk stoom.
- Midden druk stoom.
- Hoge druk stoom.

De lage druk stoom heeft een condensatie temperatuur van 143°C. Die is lager dan de uitgangstemperatuur van de w.w. en dus niet te gebruiken.

De midden druk stoom (19 bar abs.) heeft een condensatietemp. van 210°C en is dus wel geschikt.

De stoom is op een temp. van 330°C. Wij brengen hem terug op condensatietemp. door er water op kooktemperatuur in te versproeien (gecondenseerd water uit de w.w.). De energie nodig voor het verdampen van dat water, zorgt voor afname van de oververhittingstemp.

De energie die nodig is om het mengsel op 147°C te brengen, is:

$$Q = C_p * \Delta T * m = 5592.5 \text{ kJ}$$

De daarvoor benodigde hoeveelheid stoom:

$$h(\text{stoom}) 330 \text{ C} = 3096.1 \text{ kJ/kg.}$$

$$h(\text{stoom}) 210 \text{ C} = 2796.7 \text{ kJ/kg.}$$

$$h(\text{water}) 210 \text{ C} = 852.5 \text{ kJ/kg.}$$

$$\dot{Q} = \dot{m} * h \quad \dot{m} = \frac{5592.5}{1944.2} = 2.88 \text{ kg/s.}$$

De daarvoor nodig hoeveelheid stoom = 2.5 kg/s ; er is dus 0.38 kg/s water op kooktemp (19 bara) nodig.

We werken verder met stoom op condensatietemp. (210 °C) en 2.88 kg/s.

Geschatte w.o. 700 W/(m²K) .

Benodigde V.O. Q/(k* Tln) .

$$Tln = \frac{T_{max} - T_{min}}{\ln (T_{max}/ T_{min})} = \frac{120 - 63}{0.64} = 88.5$$

$$V.O. = \frac{5592.5 \text{ EE } 3}{700 * 88.5} = 90 \text{ m}^2$$

We nemen buizen met du = 1'' ; s = 1.25 du; driehoekig. We kiezen verder 4 passes met fixed tubes. Verder nemen we Du = 25'' . Daaruit volgt het aantal buizen n = 258 en een lengte van 4.37 m. De L/D verhouding = 7 is goed.

$$\text{De snelheid in de buisjes } c = \frac{\dot{m}}{* (n/4) * (pi/4) * (di)} = 1.25 \text{ m/s.}$$

De snelheid is voldoende.

$$Re = 1 \text{ EE } 5.$$

weerstands coefficient f = 0.0216.

$$Pr = 1.3 \quad \text{we gaan uit van } Pr/Pr_w = 1$$

Uit bovenstaande gegevens volgt dat Nu = 283.5

$$\alpha_i = Nu * \lambda / di = 283.5 * 0.61 / 0.02 = 8647.4 \text{ W/(m}^2 \text{ K) .}$$

$$\text{vuilweerstand } Ri = Ru = 0.000176$$

kies $\alpha_u = 1200 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$.

hieruit volgt $T_{\text{wand}} = 132^\circ \text{C}$.

en $T_{\text{film}} = 171^\circ \text{C}$.

m.b.v. de stofgegevens van water bij die filmtemp. vinden we $\alpha_u = 1072 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$.

Hieruit volgt $k_u = 650 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ en $A_u = 97.2 \text{ m}^2$.

We verhogen het uitwendig opp. met 15% voor in- en uitstroom verliezen. A_u wordt dus $= 112 \text{ m}^2$.

de lengte $l = 5.43 \text{ m}$. en $L/D = 8.55$ voldoet.

m.b.v. de weerstandsfactor vinden we een drukval: $P = 0.28 \text{ bar}$.

DE MATEN VAN DE W.W.

$D_i = 25'' = 0.635 \text{ m}$

$P = 0.28 \text{ bar}$.

$du/di = 0.0254/0.02 \text{ c} = 1.25 \text{ m/s}$.

aantal buizen $n = 258$

aantal keerschotten 8

4 passages

afstand tussen twee

$L = 5.43 \text{ m}$

keerschotten $= 0.61 \text{ m}$

Appendix J

WARMTEWISSELAAR GEVOLGD DOOR BUISREAKTOR. (PROGRAMMA WVENBU)

Het hoofdprogramma is opgesplitst in twee delen. De w.w. en de reaktor.

De warmte wisselaar.

Hierin wordt gewerkt met :

- TS - condensatietemperatuur
- A - doorstroomd opp.
- UA_w/L - overall w.o.coefficient vermenigvuldigd met het warmte wisselend opp. per lengte eenheid.
- T - starttemp.

De warmtewisselaar wordt tot een temperatuur T_{mid} door gerekend zoals bij de buis, met een extra term in de warmtebalans.

De grootte van de w.w. wordt iteratief bepaald, waarbij het criterium is dat de T_{mid} voldoende hoog is om na de buis een eindtemperatuur van 225°C te krijgen.

De hoeveelheid stoom die nodig is om het reaktiemengsel op juiste temp. te krijgen wordt bepaald door de totale toegevoerde energie aan het mengsel. In dit geval met oververhitte middendruk stoom. Per kg stoom wordt dan 2500 KJ afgegeven.

Het hoofdprogramma van WWENBU,
met enige resultaten.

```

*.....*.....1.....2.....3.....4.....5.....6.....7.*
1      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
2      COMMON/CONC/H2O,EO,EG,DEC,TEG,HEG,T
3      COMMON/FUNC/F1,F2,F3,F4,C,F11,F12,DX
4      COMMON/GEOM/A,UAWL,TTIJD,TS,WAR
5      COMMON/FLUX/PHIMAS,FV,CP
6      COMMON/PRIN/PLAATS,I
7      WRITE (6,*) 'ADIABATISCHE BUISREAKTOR'
8      WRITE (6,*) ' '
9      WRITE (6,*) ' H2O/EO          T-IN          A          DX          SI/PR  %-E
EG H2O-RECYCLE'
10     READ (5,*) W,T0,AD,DX,J,EGPRO,UAWLD
11     WRITE (6,91) W,T0,AD,DX,J,EGPRO,UAWLD
12     91   FORMAT (1X,4 (F9.5,1X),I3,1X,2 (F9.2))
13     TMID=420
14     TS=483
15     22   WRITE (6,*) ' '
16     WRITE (6,*) ' '
17     WRITE (6,*) 'WARMTEWISSELAAR:'
18     WRITE (6,*) ' '
19     WRITE (6,*) ' H2C          EO          EG          DFG          TEG          HEG
EG T
20     WRITE (6,*) ' '
21     WAR=0
22     UAWL=UAWLD
23     A=AD
24     T=T0
25     EO=95.25
26     H2O=W*95.25
27     EG=19.627
28     DEG=0
29     TEG=0
30     HEG=0
31     I=0
32     TTIJD=0
33     PLAATS=0
34     PHIMAS=(EO*44.1+H2O*18+EG*62.1)/1000
35     CALL CORR
36     CALL BUISJE
37     EOO=EO
38     I=I+1
39     10   CALL RK
40     PLAATS=PLAATS+DX
41     IF (I.EQ.J) CALL BUISJE
42     IF (T.LT.TMID) GOTO 10
43     CALL BUISJE
44     VTOTR=A*PLAATS
45     PHISTO=WAR/2.2D6
46     WRITE (6,50) PHISTO
47     50   FORMAT (1X,'DE BENCNDIGDE STOOM (210 C,KG/S):',E9.3)
48     WRITE (6,*) ' '
49     WRITE (6,*) 'VTOTR (M**3) TTIJD (S)'
50     WRITE (6,92) VTOTR,TTIJD
51     92   FORMAT (2 (1X,F07.2,4X))
52     WRITE (6,*) ' '
53     WRITE (6,*) ' '
54     WRITE (6,*) 'EUISREAKTOR:'
55     WRITE (6,*) ' '
56     I=0
57     TTIJD=0
58     PLAATS=0
59     A=1
60     UAWL=0
61     CALL BUISJE
62     I=I+1
63     20   CALL RK
64     PLAATS=PLAATS+DX
65     IF (I.EQ.J) CALL BUISJE
66     IF (EO/EOO.GT..0001)GOTO 20
67     CALL BUISJE
68     VTOTR=A*PLAATS
69     WRITE (6,*) ' '
70     WRITE (6,*) 'VTOTR (M**3) TTIJD (S)'
71     WRITE (6,94) VTOTR,TTIJD
72     94   FORMAT (1X,2 (F7.2,4X))
73     DELT=T-498
74     TMID=TMID-DELT
75     IF (ABS(DELT).GT.0.01) GOTO 22
76     77   END

```

WARMTEWISSELAAR:

H2O	EO	EG	DEG	TEG	HEG	T	X
.404E+02	.366E+01	.753E+00	.000E+00	.000E+00	.000E+00	.365E+03	0.00
.402E+02	.364E+01	.753E+00	.306E-04	.622E-09	.843E-14	.369E+03	0.25
.401E+02	.363E+01	.753E+00	.686E-04	.313E-08	.954E-13	.372E+03	0.50
.400E+02	.362E+01	.753E+00	.115E-03	.888E-08	.455E-12	.375E+03	0.75
.399E+02	.360E+01	.754E+00	.173E-03	.199E-07	.153E-11	.379E+03	1.00
.398E+02	.359E+01	.755E+00	.242E-03	.390E-07	.420E-11	.382E+03	1.25
.396E+02	.358E+01	.757E+00	.326E-03	.706E-07	.102E-10	.385E+03	1.50
.395E+02	.356E+01	.760E+00	.426E-03	.120E-06	.227E-10	.388E+03	1.75
.394E+02	.354E+01	.764E+00	.545E-03	.196E-06	.474E-10	.390E+03	2.00
.393E+02	.353E+01	.770E+00	.686E-03	.310E-06	.939E-10	.393E+03	2.25
.392E+02	.351E+01	.776E+00	.852E-03	.476E-06	.179E-09	.396E+03	2.50
.391E+02	.349E+01	.784E+00	.105E-02	.715E-06	.328E-09	.399E+03	2.75
.390E+02	.347E+01	.793E+00	.127E-02	.105E-05	.584E-09	.401E+03	3.00
.389E+02	.345E+01	.804E+00	.154E-02	.152E-05	.102E-08	.404E+03	3.25
.387E+02	.342E+01	.816E+00	.185E-02	.218E-05	.173E-08	.407E+03	3.50
.386E+02	.340E+01	.831E+00	.221E-02	.307E-05	.288E-08	.409E+03	3.75
.385E+02	.337E+01	.848E+00	.263E-02	.428E-05	.471E-08	.412E+03	4.00
.384E+02	.334E+01	.868E+00	.311E-02	.591E-05	.760E-08	.414E+03	4.25
.383E+02	.331E+01	.890E+00	.367E-02	.808E-05	.121E-07	.417E+03	4.50
.382E+02	.327E+01	.916E+00	.432E-02	.110E-04	.190E-07	.419E+03	4.75
.381E+02	.323E+01	.944E+00	.507E-02	.148E-04	.295E-07	.422E+03	5.00
.380E+02	.319E+01	.976E+00	.594E-02	.198E-04	.453E-07	.425E+03	5.25
.379E+02	.315E+01	.101E+01	.682E-02	.255E-04	.657E-07	.427E+03	5.47

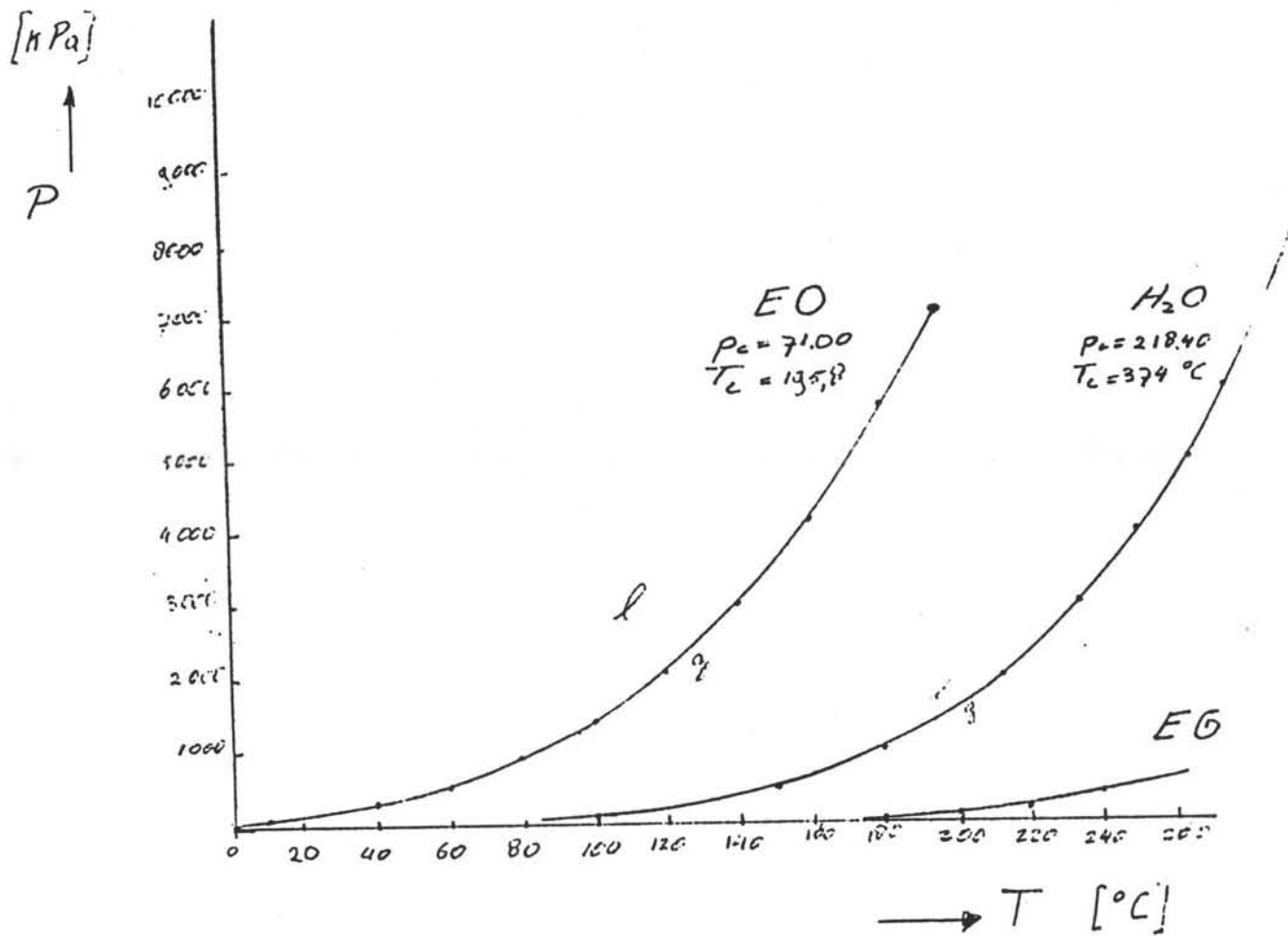
DE BENODIGDE STOOM (210 C,KG/S): 0.229E+01

VTOTR(M**3) TTIJD (S)
0.42 15.82

BUISREAKTOR:

.379E+02	.315E+01	.101E+01	.682E-02	.255E-04	.657E-07	.427E+03	0.00
.370E+02	.243E+01	.166E+01	.306E-01	.344E-03	.277E-05	.443E+03	0.25
.357E+02	.119E+01	.273E+01	.985E-01	.227E-02	.389E-04	.471E+03	0.50
.346E+02	.116E+00	.362E+01	.183E+00	.604E-02	.150E-03	.495E+03	0.75
.345E+02	.365E-02	.371E+01	.193E+00	.657E-02	.168E-03	.498E+03	1.00
.345E+02	.351E-03	.371E+01	.194E+00	.659E-02	.169E-03	.498E+03	1.16

VTOTR(M**3) TTIJD (S)
1.16 41.91



Figuur K.1
 Dampspanningen van H₂O, EO, en MEG:

Appendix K

VOOR DE DAMPDRUK VAN EEN MENGSEL GELDT BIJ BENADERING:

$$P = \sum x_i p_i$$

met: x_i = molfractie in vloeistoffase
 γ_i = activiteitscoëfficiënt van component i
 p_i = dampspanning van de zuivere component i

Hiervan zijn ons bekend de dampspanningen van de componenten van ons mengsel (zie figuur K1) en hun samenstellingen. Voor bepaling van de activiteitscoëfficiënten kan gebruik gemaakt worden van verschillende thermodynamische vergelijkingen. We hebben gebruik gemaakt van het PROCESS programma waarin de UNIFAC vergelijkingen worden gebruikt.

UNIFAC is gebaseerd op het groep contributie concept. Unifac neemt aan dat activiteitscoëfficiënten vnl. beschreven worden door een combinatie van de volgende twee effecten :

- interactie als gevolg van verschil in vorm en afmetingen van de verschillende moleculen.
- energie interactie.

Van de verschillende componenten moeten gevens worden ingevoerd over :

- structuur van de component
 - van der Waals oppervlakte en volume parameters
 - groep interactie parameters. We hebben de dampspanning van het mengsel op 11 punten in de reaktor bepaald. Zie tabel .
- De hoogste dampspanning die optreedt is 23.79 bar.

tabel Druk in de reaktor.

T (C)	H2O molfractie * 100	EO	MEG	P (bar)
420	90.15	8.17	1.68	17.84
424	90.11	7.79	2.10	17.83
429	90.08	7.32	2.60	17.68
435	90.02	6.72	3.27	17.89
443	89.98	5.98	4.04	19.10
453	89.95	5.00	5.04	20.45
465	89.89	3.77	6.34	21.76
478	89.83	2.30	7.87	22.68
490	89.81	0.99	9.20	23.55
496	89.81	0.30	9.89	23.79
498	89.82	0.08	10.10	23.01

Appendix L

WANDDIKTE REAKTOR.

De dikte van de reaktor is berekend m.b.v. de regels van het stoomwezen.

D0101 : minimum dikte ongelegeerd staal $dd > 4$ mm.

voor beoordeling : $d = dd - df - dc - dt.$

voor ontwerp : $dd > d + df + dc + dt.$

df ; dc; dt zijn de verschillende toeslagen die moeten worden vastgesteld.

D0105 : $Pd = 3.1$ MPa.

m = hoogste metaaltemp. = $225^{\circ}\text{C}.$

D0201 cilinders onder inwendige druk.

$$d = \frac{Pd * Di}{2*z*f - Pd}$$

We kiezen Fe 37 1 kw.

Fe 37 omdat het goedkoop is en bij de heersende druk, niet te dik wordt. Indien wel, nemen we een betere kwaliteit.

1 kw wil zeggen bruikbaar bij hogere temp.

minimum vloeigrens bij 225 C [?]= 152 N/mm

hieruit volgt $f = 102$ (D0201)

Er wordt zeker N.D.O. verricht, dus $z = 1.$

$$d = \frac{Pd * di}{2*z*f - Pd} = \frac{3.1 * 301.9}{204 - 3.1} = 4.7 \text{ mm.}$$

Met de verschillende toeslagen erbij en voor een genormaliserde dikte kiezen we een dikte $d = 11$ mm.

De reaktor wordt dan :

$D_i = 301.9 \text{ mm.}$

$D_u = 323.9 \text{ mm.}$

$d = 11 \text{ mm.}$

Appendix M

WARMTE VERLIES.

Voor het warmte verlies geldt :

$$\frac{l \cdot \pi \cdot \Delta T}{\frac{1}{\alpha_i d_1} + \frac{\ln d_2/d_1}{2 \cdot \lambda_{\text{staal}}} + \frac{\ln d_3/d_2}{2 \cdot \lambda_{\text{glaswol}}} + \frac{1}{\alpha_u d_3} + R}$$

Met : l = lengte van de buisreaktor.

$$\Delta T = T_{\text{buiten}} - T_{\text{reaktor}} = T_{\text{ln}} = \frac{T_{\text{max}} - T_{\text{min}}}{\ln T_{\text{max}}/T_{\text{min}}}$$

α_i = warmteoverdrachtscoëfficiënt van het mengsel in de reaktor

α_u = warmteoverdrachtscoëfficiënt van lucht

λ_{staal} = warmtegeleidingscoëfficiënt staal

λ_{glaswol} = warmtegeleidingscoëfficiënt glaswol

d_1 = inwendige diameter buisreaktor

d_2 = uitwendige diameter buisreaktor

d_3 = diameter buisreaktor + isolatie

R = vuilweerstand

Hiervan zijn λ_{staal} , λ_{glaswol} en α_u bepaald met behulp van berekeningsmethoden cq. tabellen uit de VDI-Wärmeatlas. R en zijn bepaald volgens methoden uit het dictaat "apparaten voor de procesindustrie", deel 3. We vinden dan :

$$\alpha_i = 5374 \text{ W/mK}$$

$$\alpha_u = 5.5 \text{ W/mK}$$

$$R = 0.00035 \text{ mK/W}$$

$$\lambda_{\text{staal}} = 50 \text{ W/mK}$$

$$\lambda_{\text{glaswol}} = 0.07 \text{ W/mK}$$

En hiermee vinden we voor het warmte verlies:

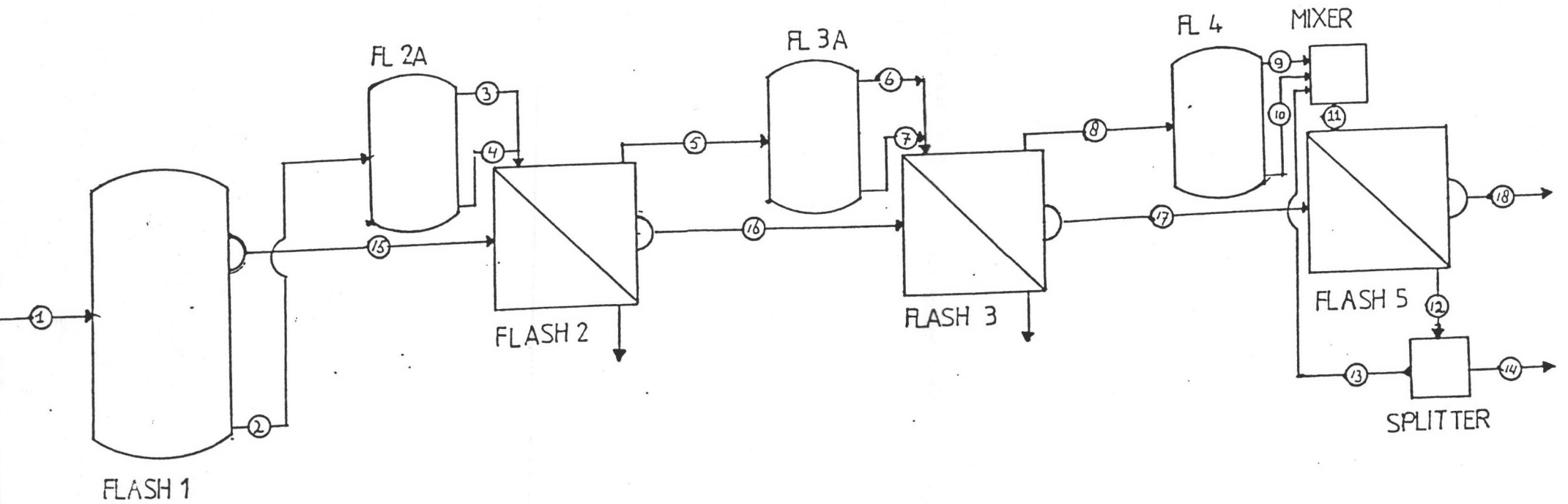
$$\text{-zonder isolatie } Q = 1011 \text{ W/m}$$

$$\text{-met 5 cm glaswol isolatie } Q = 176 \text{ W/m}$$

Temperatuur'daling' van de H₂O/EO/EG stroom door dit warmteverlies:

$$\text{-zonder isolatie } \Delta T = \frac{Q}{T \cdot C_p} = 0.49 \text{ C}$$

$$\text{-met glaswol isolatie } \Delta T = 0.08 \text{ C}$$



Figuur N1.1: Overzicht van een flash en drie verdampers bij het PROCESS programma . De streamidentities komen overeen met de in het programma gebruikte identities.

Appendix N1

PROCESS PROGRAMMA VOOR HET ONTWERP VAN EEN 4 TRAPS VERDAMPER

VERSION 0882

SM
 PROCESS INPUT LISTING - PAGE 1

TITLE PROJECT=FLASH4,PROBLEM=FLASH,USER=JAAP,*
 DATE=4-3-87
 DIMENSION SI
 COMPONENT DATA
 LIFIC 1,WATEF/2,EG/3,PEG/4,TEG
 GROUP 3844,2.52,2.5927
 THERMO DATA
 TYPF RTYP=LACT
 KSET SETNO=1,SRKVFUG
 UNIFAC
 STREAM DATA
 PROP STRM=1,TEMP=498,PRES=3000,RATE(M)=3854.9016,*
 COMP1,0.8981265/2,0.0966541/3,0.0050423/4,0.000176113
 UNIT OPERATION
 FLASH UID=FL1
 FEED 1
 PROD V=15,L=2
 ADIA PRES=500,TEST=397
 FLASH UID=FL2A
 FEED 2
 PROD V=3,L=4
 ADIA PRES=247,TEST=382
 FLASH UID=FL2
 FEED 3,4
 PROD V=16,L=5
 TPSPEC PRES=247,TEST=382
 SPEC DUTY=25.6
 FLASH UID=FL3A
 FEED 5
 PROD V=6,L=7
 ADIA PRES=102,TEST=370
 FLASH UID=FL3
 FEED 6,7
 PROD V=17,L=6
 TPSPEC PRES=102,TEST=370
 SPEC DUTY=33.2
 FLASH UID=FL4
 FEED 8
 PROD V=9,L=10
 ADIA PRES=10,TEST=350
 MIXER UID=M1
 FEED 9,10,13
 PROD M=11
 FLASH UID=FL5
 FEED 11
 PROD V=18,L=12
 TPSPEC PRES=10,TEST=350
 SPEC DUTY=39.2
 SPLITTER UID=S1
 FEED 12
 PROD L=13,L=14
 SPEC STRM=13,RATE=.5,REFFEEDS
 END

Appendix N

PROGRAMMA UITREKENEN VAN DE VERDAMPERS.

***** Berekening van gas-en vloeistof fracties *****
 ***** op gewichts- of molbasis.*****

```

10  "C":IF GR=1 COTO 180
20  READ Z1:READ Z2:READ Z3:READ Z4:READ J1:READ J2:
    READ J3:READ J4
30  READ XI:READ XT:READ YT:READ XK
      Inlezen van de vloeistof- en gasstromen,
      in- en uitgaande stromen, alsook
      Inlezing molfracties water van de
      de massafractie van de afge'flash'te
      gasstroom die de verdamper ingaat.
40  D=Z1+Z2+Z3+Z4
      Totale stroom in kmol/hr
50  L5=Z1*18:G1=J1*18
60  L6=Z2*62:G2=J2*62
70  L7=Z3*106:G3=J3*106
80  L8=Z4*150:G4=J4*150
      L5 t/m L8 vertegenwoordigen de
      massavloeistofstromen die uit de
      verdamper komen. G1 t/m G4 zijn
      de massagasstromen na de verdamper.
90  O2=G1+G2+G3+G4:G1=G1/O2:G2=G2/O2:G3=G3/O2:G4=G4/O2
100 O1=L5+L6+L7+L8:L5=L5/O1:L6=L6/O1:L7=L7/O1:L8=L8/O1
      De L- en Gstromen worden omgerekend
      naar massafracties van betreffende
      gas en vloeistof stromen.
110 OL=O1/(O1+O2)
120 OG=O2/(O1+O2)
      Bepalen van de totale massafracties
130 F1=Z1/D
140 F2=Z2/D
150 F3=Z3/D
160 F4=Z4/D
      Berekening van de molfractie uit-
      gaande vloeistofstroom.
170 DY=(XI-XT)/(YT-XT)
180 DX=(YT-XI)/(YT-XT)
      Berekening van de totale molfractie
  
```

```

                vloeistof en gas.
190  PL=(1-XT)*DX/((1-XT)*DX+(1-YT)*DY)
                % Glycol in vloeistof.
200  PG=(1-YT)*DY/((1-XT)*DX+(1-YT)*DY)
                % Glycol in gas.
210  WL=XT*DX/(XT*DX+YT*DY)
                % Water in vloeistof.
220  WG=YT*DY/(XT*DX+YT*DY)
                % Water in gas.
230  MP=(1-XK)*MP
                Aanpassen tot werkelijke product-
                stroom die door verdamper heengaat.
240  IF Y=1 RETURN
                Y is een programmparameter zodat
                wordt teruggesprongen naar het
                goede programmaonderdeel.
250  GOTO "C"

**** INVOER DIMENSIES VERDAMPER BEREKENING L/D,*****
***** Pr,Bevloeiing,Q max *****

260  " ":IF GR=1 LET R$="OK":GOTO 460
                Al berekening al is doorlopen, moet
                dit onderdeel worden overgeslagen.
270  INPUT "Dr=";RD,"Bdu=";DU,"st=";S,"#b=";N,"stv=";PY$
                Invoer van Rompdiameter, buis-
                diameter, steekafstand, aantal
                buizen en steekvorm.
280  IF RD>37 GOSUB "E"
                Indien rompdiameter boven 37" ligt
                wordt het aantal buizen uitgerekend
                met de formule in subroutine "E".
290  RD+RD*25.375E-3
                Omrekenen van inch naar meter.
300  RG=RD
310  DU=DU*25.375E-3
320  XQ=4*MW/(PI*DU*VI)/N
                Reynoldsgetal voor stroming om
                buizenbundel van condenslaag.
330  DI=(DU-2*X1)
                Bepaling van inwendige diameter.
340  S=S*25.375E-3
350  O=N*PI*DU
                Buitenomtrek pijpen.
360  V=AA
370  L=V/O:L1=L
                Bepaling van lengte van de buis.
380  Q5=350*AA*((DI 2)/L) (0.35)*
                PC (0.6)*(P/PC) (0.25)*(1-P/PC)
                Berekening van maximale warmte.[6]
390  IF PY$="D" LET DE=4*(.86/2*S*S-
                PI/8*DU 2)/(0.5*PI*DU)
400  IF PY$="V" LET DE=4*(S*S-PI/4*

```



```

DU 2)/(PI*DU)
      Berekening van de hydraulische
      diameter afhankelijk van de
      steekvorm (D=driehoek en V=vierkant).
410 IF (PY$="V" OR PY$="D") GOTO 430
420 GOTO 270
      Geen D of V ingevoerd, terug
      naar invoer op regel 270.
430 PRINT "L/D=";L1/RC;" (/)"
      Uitvoer van L/d verhouding.
440 IF GG=1 RETURN
      Programmparameter.
450 INPUT "OK=OK=";R$
      Dimensies volgens wens : ga door,
      anders terug naar regel 270.
460 M=N*PI*DI:LX+MP*DX/(RL*M)
      Binnenomtrek en bevoelingsberekening
470 PR=VI*CP/LA
      Berekenen van Prandtlgetal.
480 IF R$="OK" RETURN
490 R$=" "
500 GOTO " "

```

```

***** BEPALING VAN DE UITWENDIGE *****
***** WARMTEOVERDRACHTSCOEFFICIENT *****

```

```

510 ", "
520 IF XQ>2100 GOTO 550
      Criterium turbulentie.
530 AU=0.943*(LA 3*RL 2*H*9.81/VI/(TU-TW)/L) (0.25)
      Warmteoverdrachtscoefficient
      volgens formule X.X.X
540 GOTO 580
550 AU=0.003*(LA 3*RL 2*9.81*L*
      Uitwendige warmteoverdrachts-
      coefficient
560 GOTO 580
570 RETURN
590 GOTO ", "
600 M=N*PI*DI
610 IF SS$="BILLET" GOSUB "BILLET"
620 IF SS$="DG1" GOSUB "DG1"
630 IF SS$="DG2" GOSUB "DG2"
      Dit onderdeel zorgt ervoor dat de
      gekozen methode wordt gerund.
640 IU=(DU/DI/AI) (-1)
      De warmteoverdrachtscoefficient
      wordt berekend.
650 TW=TI-(AU/(AU+IU))*(TI-TU)
      Berekening van de wandtemperatuur
      als functie van diameters en warmte-
      overdrachtscoefficienten.
660 MA=1:GOSUB 860

```

```

670 IF II=1 RETURN
      Controleparameters van het programma.
680 GOTO "R"

***** BEGIN VAN PROGRAMMA *****
***** BEREKENING Q'S, SNELHEDEN, KU'S, ETC... *****

690 "F":CLEAR:SS$="BILLET":RESTORE:
      INPUT "Andere methode ? ";JJ$:IF JJ$="N" GOSUB 1070
      Mogelijkheid om niet met Billet te beginnen,
      maar met een andere methode.
700 IF JJ$="DG1" LET SS$="DG1"
710 IF JJ$="DG2" LET SS$="DG2"
      Indien andere methode gewenst is, wordt
      SS$ veranderd in de te volgen methode.
720 IF TU=0 GOTO "F"
      Is er een niet bestaande methode ingevoerd
      ga dan terug naar af. Controle : Als TU nul
      is, betekent dit dat er niets ingelezen is.
730 Y=1:GOSUB "C"
      De eerste subroutine wordt aangeroepen
      De controleparameter staat op 1, zodat
      in de subroutine RETURN wordt geactiveerd.

740 Y=0
750 MP=(1-XK)*GT
760 C=QQ
      De ingelezen waarde QQ wordt gebruikt
      voor de berekeningen.
      De massastroom(in) wordt gecorrigeerd
      voor het al verdampte deel in de flasher.
770 Q2=MP*OG*DH/3600
      Ter controle ingebouwde berekening voor
      toegevoerde energie.
780 Q1=MP/3600*CP*(TB-T0)
      De energie nodig om de voeding op te warmen
      wordt berekend.
790 MW=QQ/H
      De toe te voeren massastroom stoom wordt
      berekend.
800 AA=QQ/KU/(TU-TI)
      Oppervlaktebepaling.
810 QA=QQ/AA
      Berekening van de warmteflux Q"
820 GOSUB " "
      Subroutine "dimensioneren verdamper"
      wordt aangeroepen.
830 RE=LX/3600/(VI/RL)
860 IF MA=1 LET MA=0:RETURN
870 II=1:GOSUB " ,"
      Subroutine "Berekening uitwendige
      warmteoverdrachtscoefficient" wordt
      aangeroepen.
880 GOSUB 600

```

Op regel 600 wordt de subroutinewijzing van de te volgen methode geregeld.

```

890 IF (TW<>TQ) LET TQ=TW:GOTO 870
      Het programma wordt zoveel malen doorlopen
      tot de berekende TW in regel 650 overeenkomt
      in de vorige slag berekende TQ
      (TQ=TW(vorige slag))

900 II=0
910 C1=MP*OL/3600/(RL*PI/4*(DI 2-(DI-2*FD) 2)*N)
      Berekening van de vloeistofsnelheid in de
      filmlaag.
920 CD=(MP*OG+GT*GT)/3600/(RV*PI/4*(DI-2*FD) 2*N)
      Berekening van de gassnelheid die
      door de "annulus" stroomt.
930 KE=1/(DU/DI*(1/AI+RI)+DU/120*LN(DU/DI)+RU+1/DU)
      Berekening van de overall warmte-
      overdrachtscoefficient.
940 AR=(Q1+Q)/KE/(TU-TI)
      Het uiteindelijke oppervlak wordt berekend
      met de gecorrigeerde ku.
960 AR=AR*1.15
      Het berekende oppervlak wordt vermeerderd
      met 15 % om verliezen op te vangen.
970 LE=AR/(N*PI*DU)
      De effectieve pijplengte wordt berekend.
990 GG=0
1000 IF (KE<>KU) LET KU=KE:GR=1:GOSUB 740:GR=0
      Voor het bepalen van de goede overall
      warmteoverdrachtscoefficient wordt
      een iteratie toegepast. KU is het
      geheugen voor de laatste berekende KE.
1020 GOSUB "PR"
      Als beide iteraties met succes zijn
      afgesloten, wordt subroutine PRINT
      aangeroepen.
1030 IF SS$="DG1" GOTO 1050
1031 IF SS$="DG2" GOTO 1060
      Voorkomen van herhaling van een bepaalde
      Methode.
1040 SS$="DG1":GR=1:GOSUB 1070:GOTO 740
1050 SS$="DG2":GOSUB 1070 :GOTO 740
1060 GOTO "F"

```

***** INLEES-SUBROUTINE VAN PROGRAMMAVARIABLEN *****

```

1070 RESTORE:READ TU           Lees temperatuur stoom
1080 READ H                   Lees enthalpie stoom
1090 READ PU                   Lees uitwendige druk
1100 READ TI                   Lees temperatuur verdamper
1110 READ H1                   Lees enthalpie feed
1120 READ P                     Lees binnendruk
1130 READ KU                   Lees schatting overall
                               warmteoverdrachtscoeff.

```

1140	READ	MP:GT=MP	Lees	massastroom feed
1150	READ	RL	Lees	dichtheid vloeistof
1160	READ	RV	Lees	dichtheid damp
1170	READ	SI	Lees	oppervlaktespanning
1180	READ	VI	Lees	viscositeit vloeistof
1190	READ	CP	Lees	warmtecapaciteit
1200	READ	LA	Lees	warmtegeleidingscoeff.
1210	READ	RI	Lees	Foulingfactor inwendig
1220	READ	RU	Lees	foulingfactor uitwendig
1230	READ	TO	Lees	Temperatuur binnenkomst
1240	READ	TW:TQ=TW	Lees	schatting wandtemperatuur
1260	READ	VD:READ X1:READ BR	Lees	dampviscositeit, buisdikte, 'Boiling Range'
1270	READ	PC:READ TB:READ BB:READ QQ	Lees	Kritische druk, kook- temperatuur, activiteitscoeff.
1280	RETURN			
1290	DATA			
1300	DATA			
1310	DATA			
1320	DATA			

In de regels 1290-1320 worden alle gegevens opgeslagen.

***** PRINT SUBROUTINE *****

1330	"PR":BEEP 1	
1340	K=-8.314*TI*TI/DH*BB*LN(1-CG)	Berekening van de kookpuntsverhoging.
1350	PRINT "Xwi=";XI	Molfractie in
1360	PRINT "Xwmf(uit)=";F1	Molfractie water uit
1370	PRINT "Xmgf(uit)=";L5	Massafractie water uit
1380	PRINT "Xwt=";XT	Molfractie water uit
1390	PRINT "Ywt=";YT	Molfractie waterdamp uit
1400	PRINT "% Glyc l=";PL	% Glycolen in vloeistof
1410	PRINT "% Waterl=";WL	% Water in vloeistof
1420	PRINT "% Glyc g=";PG	% Glycolen in gas
1430	PRINT "% Waterg=";WG	% Water in gas
1440	PRINT "% Liquid=";DX	Totale vloeistoffractie
1450	PRINT "% Gas =" ;DY	Totale gasfractie
1460	PRINT "du =" ;DU;" m"	Uitwendige buisdiameter
1470	PRINT "di =" ;DI;" m"	Inwendige buisdiameter
1480	PRINT "# buizen =" ;N;" (/)"	Aantal buizen
1490	PRINT "Opp =" ;AA;" m 2"	Oppervlakte buizen
1500	PRINT "Omt =" ;O;" m"	Omtrek buis
1510	PRINT "L =" ;L;" m"	Lengte buis
1520	PRINT "Di =" ;RD;" m"	Rompdiameter
1530	PRINT "L/Di =" ;L1/RG;" (/)"	Lengte/diam. verh.
1540	PRINT "st =" ;S;" m"	Steekafstand
1550	PRINT "Au =" ;AU;" " ;PY\$	Uitw. Warmteoverdrachtscoeff.
1560	PRINT "Au (contr.) =" ;A8;" W/M 2/K"	Controle hierop.
1570	PRINT "Ai =" ;AI;" W/M 2/K"	Inw. warmteoverdrachtscoeff.
1580	PRINT "fd =" ;FD;" m"	Filmdikte

```

1590 PRINT"Nu=";NU;" (/)"      Nusseltgetal
1600 PRINT"Pr=";Pr;" (/)"      Prandtlgetal
1610 PRINT"Intr. vis=";VI/RL;" M 2/S"  Intr. viscositeit
1620 PRINT"Re uit =" ;XQ;" (/)"      Reynoldsgetal uitwendig
1630 PRINT"Re (Billet)=";R1;" (/)"  Reynolds volgens Billet
1640 PRINT"Re (Labunt)=";R2;" (/)"  Reynolds volgens Labuntsov
1650 PRINT"Re (Chen )=";R3;" (/)"  Reynolds volgens Chen
1660 PRINT"Re (ctr.Ch.)=";R6;" (/)" Norm. Reynolds bij Chen
1670 PRINT"TI =" ;K;" K"          Kookpuntsverhoging
1680 PRINT"TW=";TW;" K"          Wandtemperatuur
1690 PRINT"Q (max) =" ;Q5;" W"     Maximale warmte
1700 PRINT"Q (opw) =" ;Q1;" W"     Warmte nodig voor opwarmen feed
1710 PRINT"Q =" ;Q;" W"           Warmte die wordt toegevoerd.
1720 PRINT"Q (zelf)=";Q2;" W"     Zelf berekende warmte (Contr.)
1730 PRINT"Q/AA =" ;QA;" W/M 2"    Warmteflux
1740 PRINT"Ber ku=";KE;" W/M 2/K"  Uiteindelijke overall.
                                     warmteoverdrachtscoeff.
1750 PRINT"Opp+15%=";AR;" M 2"    gecorrigeerd oppervlak
1760 PRINT"Leff =" ;LE           Effectieve pijplengte
1770 PRINT"Mw =" ;MW;" kg/s"      Warme massastroom
1780 PRINT"Mp =" ;MP;" kg/h"      Product massastroom
1790 PRINT"C1="C1;" M/S"         Liquidsnelheid
1800 PRINT"Cd=";CD;" M/S"         Dampsnelheid
1810 PRINT"L (in) =" ;LX;" M 3/h/M"  Bevloeiing
1820 PRINT"Memorie left..." ;MEM  Geheugen computer over
1830 RETURN

```

***** METHODE VAN BILLET *****

```

1840 "BILLET"
1850 M=N*PI*DI
1860 R1=R1*LX/3600/VI
                                     Reynoldsgetal volgens Billet
1870 IF R1>400 GOTO 1930
                                     Criterium voor turbulente stroming
1880 NU=(3/9.81*(VI/RL) 2) (1/3)
                                     Nusseltgetal
1890 PAUSE "Lam":S0=(3*VI*LX/RL/9.81/3600) (1/3)
                                     Berekening van beginfilmdikte S0
1900 SU=(S0 4-4*LA*VI*(TW-TI)*L/9.81/H1/RL 2) (0.25)
                                     Berekening filmdikte S0
1910 FD=(S0+SU)/2
1920 GOTO 1970
1930 PAUSE "TURBULENT"
1940 FD=0.369*(3/9.81*(VI/RL) 2) (1/3)*R1 (0.5)
                                     Berekening van de filmdikte bij turbulentie
1950 NU=(0.152-0.778)/(PR+5.47))*R1 (1/3)
                                     Nusseltgetal behorende bij turbulente film laag
                                     volgens Billet
1960 AI=NU*LA*(9.81/(VI/RL) 2) (1/3)
                                     Inwendige warmteoverdrachtscoefficient
1970 RETURN

```

***** METHODE VOLGENS LABUNTISOV *****

```

1980 "DG1"
1990 R2=LX*RL/3600/VI
2000 IF R2>400 GOTO 2050
                Turbulentie criterium van Labuntsovmethode
2010 FD=0.91*(VI 2/RL 2/9.81) (1/3)*R2 (0.5)
                Berekening van de filmdikte aan
                de binnenkant vande pijp.
2020 PAUSE "LAMINAIR"
2030 AI=LA/FD
                Berekening van de inwendige
                warmteoverdrachtscoefficient.
2040 RETURN
2050 FD=0.27*(VI 2/RL 2/9.81) (1/3)*R2 (0.5)
                Berekening van de film laagdikte
                bij turbulent gedrag.
2060 PAUSE "TURBULENT"
2070 AI=0.023*(VI 2/RL 2/9.81) (-1/3)*R2 (0.25)*PR (0.5)
                Berekenen van de inwendige
                warmteoverdrachtscoefficient in geval
                van turbulent stromingsgedrag.
2080 RETURN

```

***** METHODE VOLGENS CHEN *****

```

2090 "DG2"
2100 R3=LX*RL*OL/3600/VF*4
                Reynoldsgetal geldig bij de
                methode van Chen.
2110 FD=0.27*(VI 2/RL 2/9.81) (1/3)*R3 (0.5)
                Film laagdikte.
2120 TT=OL/OG*(RV/RL) (0.5)
                De lockart-Martinelli-parameter.
2130 IF (1/TT)<= 0.1 LET FC=1 :PAUSE "CHECK FC=1":
                BEEP 5:GOTO 730
2140 FC=2.35*(1/TT+0.213) (0.736)
                Berekening van de correctie factor
                voor tweefasenstroming Fc
2150 FM=EXP(-0.027*BR)
                Berekening van de mengsel correctiefactor
2160 AC=0.023*R3 (0.8)*PR (0.4)*FC
                warmteoverdrachtscoefficient convectie
2170 R6=R3*FC (1.25)
                Tweefasenstroming Reynoldsgetal
2180 FS=1/(1+2.53E-6*r6 1.17)
                Berekening nucleate boiling suppressionfactor
2190 AB=1.8E-15*PC (2.3)*(TW-TI) (2.33)*(?????????) 3.33
                warmteoverdrachtscoefficient nucleate Boiling.
2200 AI=AB*FS*FM + AC
2210 MM=4*LX*RL/DI/TT/3600:IF MM>2400 PRINT"MIST";MM;">2400"
                Mistflow criterium volgens Flair
                Melding als MM > 2400.

```

2220 RETURN

***** DATALIJNEN VOOR INVOER STROMEN EN FRACTIES*****

2400 DATA

2410 DATA

2420 DATA

*** BEREKENING AANTAL BUIZEN ROMDIAMETER > 37 INCH ***

2430 "E"

2440 PAUSE "RD > 37"

2450 $N = ((RD - 1.08) \cdot 2 \cdot \pi / 4 - 0.9) - s \cdot (RD - 1.08) \cdot (0.69 - 0.8)$

Pijpaantalberekening de constanten in
de formule zijn afhankelijk van pijp-
diameter en steekafstand. (zie bijlage X.X.X).

2460 RETURN

Appendix O

UITVOER VAN HET PROGRAMMA

De uitvoer van het programma gegeven in bijlage X.X.X, kan men onderverdelen in uitvoer die voor de drie methoden hetzelfde is, en de uitvoer die afhankelijk is van de gevolgde methode. In deze bijlage wordt ook de invoer van het programma opgegeven. De indeling van deze bijlage is als volgt :

- Invoergegevens voor het programma.
- Gemeenschappelijke uitvoergegevens van de methoden.
- Uitvoergegevens afhankelijk van de gevolgde methode.

Deze volgorde zal herhaald worden voor elk van de verdamper afzonderlijk.

0.1 Verdamper 1

Invoergegevens voor de eerste verdamper :

T (uit)	425.0100	K	T (in)	404.3962	K
H (cond.)	2108.5000	J/kg	H (vap.)	2250.6330	J/kg
P (uit)	500.0000	kPa	P (in)	247.0000	kPa
ku (est.)	800.0000	W/m ² K	Toeg.En.	711.00E4	J/s
(vl.)	956.3900	kg/m ³	(damp)	4.6782	kg/m ³
(vl.)	0.0002	N/ms ²	(damp)	141.5E-7	N/ms ²
Cp	4186.0000	J/kgK		0.5861	W/mK
Ri	352.1E-6	W/m ² K	Ru	170.1E-6	W/m ² K
T0	403.5901	K	TW (est.)	415.0000	K
T (kook)	403.6480	K	Kooktraj.	37.9219	K
	1.1310		Buisdikte	0.00211	m
Pc	99.0400	Pa		0.0450	W/mK
Massflow	75291.35 0	kg/h	X (H2O) in	0.8718	(/)
X (H2O) uit	0.8392	(/)	Y (H2O) uit	0.9912	(/)

Bij de invoergegevens zijn de waarden voor ku en T(wand) geschatte waarden die door het programma worden geoptimaliseerd.

De diverse invoergegevens en stofconstanten zijn uit verschillende bronnen gehaald. [23][4]:[26][29]

De gemeenschappelijke uitvoergegevens van de methoden voor verdamer 1 ziet er als volgt uit :

buis du	0.01903	m	buis di	0.0148	m
# buizen	1127.0000	(/)	buisdikte	0.0021	m
steekaf.	0.0254	m	Steekvorm	driehoek	
lengte	6.3985	m	Mantel Di	0.9389	m
L/Di	6.8151	(/)	Cmtrek	67.3816	m
Nu	0.2123	(/)	Pr	1.4284	(/)
Re(uit)	1000.8870	(/)	f	127.2E-4	(/)
(liq.)	209.1E-7	m ² /s			
Mw	3.3720	kg/s	Mp(na fl)	71895.7500	kg/h
l'(in)	1.1261	m ³ /hm	Delta T	0.1557	K
Q(opw)	4840.3699	W	Q	7110000.0000	W
			Q(zelf)	9157310.3130	W
% Glyc(l)	0.9853	(/)	% Glyc(g)	0.0147	(/)
% H ₂ O(l)	0.7562	(/)	% H ₂ O(g)	0.2438	(/)
% Liquid	0.7855	(/)	% Gas	0.2144	(/)

De uitvoer Q(zelf) is de energie die met behulp van programmaregel 770 wordt berekend. Dit is een soort van controle op de ingevoerde warmte Q, zodat men enig inzicht blijft houden op de juistheid van dit getal. Enige afwijking is toelaatbaar. De 'overall warmteoverdrachtscoëfficiënt' ku en de wandtemperatuur Tw, worden in het begin van het programma meegegeven, zodat bij alle berekeningen een startwaarde bekend is. Gedurende het programma wordt naar de goede startwaarde geïtereerd.

De uitvoergegevens afhankelijk van de gevolgde methode.

	BILLET	LABUNTSOV	CHEN	
i	7559.7300	10387.2200	2358.4000	W/m ² K
u	3692.2040	3582.8940	4075.0960	W/m ² K
Filmd	33874.5E-8	171858.0E-8	306700.0E-4	m
Re(in)	1495.7740	1495.7740	4764.1210	(/)
Q(max)	26144085.0000	25243366.7500	31127864.7400	W
Q"	18687.3570	19354.1487	14191.9950	W/m ²
ku(ber)	906.5450	938.8912	688.4700	W/m ² K
Oppervl.	380.4711	367.3630	500.9866	m ²
+15%	437.8397	422.7552	576.5210	m ²
L(eff)	6.4979	6.2740	8.5560	m
L(eff)/Di	6.9209	6.6825	9.1132	(/)
C(liq)	0.9058	1.8666	1.0556	m/s
C(gas)	6.0590	5.7827	6.0046	m/s
T(wand)	411.9600	410.3909	418.6086	K
Turbulent:	*	*	*	

Het getal ku(ber) is de geitereerde waarde van de overall waarmteoverdrachtscoëfficiënt. De waarde van T(wand) is eveneens een geitereerde waarde. De ster achter turbulent betekent dat een turbulent stromingsgedrag in de verdamper aanwezig is. De L/Di verhouding die wordt opgegeven door het programma is sterk afhankelijk van de geschatte beginwaarde van de 'overall' waarmteoverdrachtscoëfficiënt ku. De L(eff)/Di geeft de werkelijke verhouding aan. Een goede shatting van ku is zeer belangrijk aangezien het programma daar gevoelig voor is.

0.2 Verdamper_2

Invoergegevens voor de tweede verdamper :

T(uit)	400.1880	K	T(in)	379.3652	K
H(cond.)	2182.7000	J/kg	H(vap.)	2280.0000	J/kg
P(uit)	247.0000	kPa	P(in)	102.0000	kPa
ku(est.)	800.0000	W/m2K	Massflow	59951.1406	kg/h
(vl.)	1028.8990	kg/m3	(damp)	2.0461	kg/m3
(vl.)	0.0020	N/ms2	(damp)	117.2E-7	N/ms2
Cp	3977.4600	J/kgK		0.5778	W/mK
Ri	352.1E-6	W/m2K	Ru	170.1E-6	W/m2K
TO	377.2009	K	TW(est.)	385.0000	K
T(kook)	379.4990	K	Kooktraj.	54.0220	K
	1.0880		Buisdikte	0.00211	m
Pc	99.0400	Pa		0.0450	W/mK
			Toeg.En.	9223.00E3	J/s

De gemeenschappelijke uitvoergegevens van de methoden voor verdamper 2 ziet er als volgt uit :

buis du	0.01903	m	buis di	0.0148	m
# buizen	1127.0000	(/)	buisdikte	0.00211	m
steekaf.	0.0254	m	Steekvorm	driehoek	
lengte	8.2168	m	Mantel Di	0.93888	m
L/Di	3.7518	(/)	Omtrek	67.381	m
Nu	0.1839	(/)	Pr	1.3767	(/)
Re(uit)	1213.1490	(/)	f	0.0451	(/)
(liq.)	194.44E-9	m2/s			
Mw	4.0872	kg/s	Mp(na fl)	57069.48	kg/h
l'(in)	0.6180	m3/hm	Delta T	0.1988	K
Q(opw)	144902.9730	W	Q	9223000.0000	W
			Q(zelf)	1062746.4E+1	W
% Glyc(l)	0.9029	(/)	% Glyc(g)	0.0907	(/)
% H2O(l)	0.5183	(/)	% H2O(g)	0.4817	(/)
% Liquid	0.5843	(/)	% Gas	0.4157	(/)

De uitvoergegevens afhankelijk van de gevolgde methode.

	BILLET	LABUNTSOV	CHEN	
i	6777.7243	9385.3488	1666.0290	W/m ² K
u	3645.7657	3527.99678	4686.8468	W/m ² K
Filmd	24791.2E-8	12577.5E-8	21135.7E-8	m
Re(in)	803.1455	883.1455	2493.8928	(/)
Q(max)	25551209.8300	24563862.5000	37387297.0400	W
Q"	18490.2680	19233.4873	12636.6112	W/m ²
ku(ber)	887.9819	923.6745	606.8644	W/m ² K
Oppervl.	498.8030	479.5282	729.8633	m ²
+15%	573.6233	560.1213	852.5295	m ²
L(eff)	8.5131	8.3126	12.6522	m
L(eff)/Di	9.0673	8.8537	13.4759	(/)
C(liq)	0.8509	1.6632	0.9950	m/s
C(gas)	14.7166	14.2260	14.6700	m/s
T(wand)	387.8753	386.1470	395.6799	K
Turbulent:	*	*	*	

0.3 Verdamper 3

Invoergegevens voor de derde verdamper :

T(uit)	373.3280	K	T(in)	351.6475	K
H(cond.)	2256.5600	J/kg	H(vap.)	2314.8000	J/kg
P(uit)	102.0000	kPa	P(in)	10.0000	kPa
ku(est.)	800.0000	W/m ² K	Massflow	56065.3044	kg/h
(vl.)	1050.0760	kg/m ³	(damp)	0.2133	kg/m ³
(vl.)	0.2E-3	N/ms ²	(damp)	117.2E-7	N/ms ²
Cp	3056.0000	J/kgK		0.5770	W/mK
Ri	352.1E-6	W/m ² K	Ru	170.1E-6	W/m ² K
T0	327.1220	K	TW(est.)	360.0000	K
T(kook)	327.1282	K	Kooktraj.	60.2249	K
	1.1530		Buisdikte	0.0211	m
Pc	99.0400	Pa		0.0450	W/mK
			Toeg.En	108889.97E+2	J/s

De gemeenschappelijke uitvoergegevens van de methoden voor verdamer 3 zien er als volgt uit :

buis du	0.01903	m	buis di	0.0148	m
# buizen	1127.0000	(/)	buisdikte	0.00211	m
steekaf	0.0254	m	Steekvorm	driehoek	
lengte	9.3100	m	Mantel Di	0.9389	m
L/Di	9.9238	(/)	Omtrek	6.3816	m
Nu	0.1447	(/)	Pr	1.0428	(/)
Re(uit)	1432.2860	(/)	f	157.3E-2	(/)
(liq.)	190.46E-9	m ² /s			
Mw	4.8255	kg/s	Mp(na fl)	56065.3000	kg/h
l [*] (in)	0.4383	m ³ /hm	Delta T	0.1940	K
Q(opw)	0.0000	W	Q	10888997.2000	W
			Q(zelf)	11457548.5300	W
% Glyc(l)	0.9320	(/)	% Glyc(g)	0.0679	(/)
% H ₂ O(l)	0.1127	(/)	% H ₂ O(g)	0.8873	(/)
% Liquid	0.4305	(/)	% Gas	0.5695	(/)

De uitvoergegevens afhankelijk van de gevolgde methode.

	BILLET	LABUNTSOV	CHEN	
i	5485.7069	7637.2980	971.6000	W/m ² K
u	3655.4440	3517.6848	5259.5950	W/m ² K
Filmd	20807.9E-8	10550.0E-8	17455.5E-8	m
Re(in)	639.2789	639.2780	1747.8900	(/)
Q(max)	16271082.7200	15502431.9500	30243935.1500	W
Q"	18529.1780	19447.9027	9968.6030	W/m ²
ku(ber)	854.6472	897.0220	459.7900	W/m ² K
Oppervl.	537.6675	559.9060	1092.3290	m ²
+15%	575.6675	643.8910	1256.1780	m ²
L(eff)	10.0297	9.5559	18.6400	m
L(eff)/Di	10.6819	10.1780	19.8535	(/)
C(liq)	0.9423	1.8444	1.1200	m/s
C(gas)	125.9717	122.4580	124.8000	m/s
T(wand)	361.6480	359.7080	370.6030	K
Turbulent:	*	*	*	

Uit de uitgebreide stroom van informatie kunnen we een duidelijke trend signaleren. De inwendige warmteoverdrachtscoëfficiënt is bij de methode volgens Labuntsov altijd hoger dan bij de methoden volgens Billet en Chen, waar de warmteoverdrachtscoëfficiënt altijd vrij laag is. Ook voorspellen de verschillende methoden een andere wandtemperatuur, zodat de overall warmteoverdrachtscoëfficiënt zal variëren.

Een eigenaardigheid van de uitvoer bij de methode volgens Chen is een dikkere filmlaag bij deze methode dan bij de methode volgens Labuntsov. Dit is eigenaardig omdat bij de methode

volgens Chen rekening wordt gehouden met de zogenaamde 'vapor shear' op de filmlaag. Hierdoor zou de filmlaag dunner moeten worden. Wegens gebrek aan tijd kon geen diepgaand onderzoek plaatsvinden naar de oorzaak van dit verschijnsel. De resultaten van deze methode zijn twijfelachtig en daarom wordt deze methode niet in overweging genomen bij het uiteindelijk ontwerp.

Tijdens het dimensioneren van de verdamper werd uitgegaan van een standaard pijpplaat, en dus evenveel pijpen, voor alle drie verdamperen zodat enige uniformiteit wordt nagestreefd.

De methode met de minst gunstigste 'overall' warmteoverdrachtscoëfficiënt zal worden gekozen. Als de uiteindelijke warmteoverdrachtscoëfficiënt dan hoger uitvalt is dit meegenomen. Bij alle drie de verdamperen is de methode volgens Billet.

De eerste verdamper heeft volgens de methode van Billet een effectieve lengte van 6.4979 meter en een diameter van 0.9389 meter. Er wordt een goede warmteoverdracht bereikt met een overall warmteoverdrachtscoëfficiënt van 906.545 W/m²/K. De filmdikte is ruim voldoende om alle buizen in voldoende mate te bevoelien, zodat recirculatie niet nodig is.

De tweede verdamper heeft een effectieve pijplengte van 8.5131 meter en uiteraard een zelfde diameter als de eerste verdamper. Ook bij deze verdamper is de overall warmteoverdrachtscoëfficiënt voldoende hoog om een goede warmteoverdracht te garanderen.

De derde verdamper werkt wel met een recirculatiestroom omdat de oorspronkelijke bevoeiing niet voldoende was om de pijpen van droogvallen te behoeden. Er is voor een recirculatie stroom van de helft van de productstroom gekozen, en ook zodanig met Process [29] doorgerekend. Uit de resultaten blijkt de dampnelheid aardig te zijn opgelopen zodat dit enige invloed zal hebben op de warmteoverdracht.

Appendix P

BEREKENING VAN HET AANTAL BUIZEN BIJ EEN BEPAALDE ROMPDIAMETER.

Het aantal buizen in een warmtewisselaar bij een diameter kleiner dan 37" kan men halen uit Tabel XXXX [?] door bij de gewenste buisdiameter, steekafstand en rompdiameter te kijken. Echter als men een warmtewisselaar wil ontwerpen met grotere diameter dan 37", is men toegewezen correlaties ??? te gebruiken. Deze correlaties zijn te herleiden tot twee vergelijkingen, een voor een ontwerp met een driehoekige steek en de ander voor een warmtewisselaar met een vierkante steek. De vergelijkingen zien er als volgt uit :

$$N_t = \frac{[(D_s - K_1)^2 \times \frac{\pi}{4} + K_2] - P \times [D_s - K_1] \times [K_3(n) + K_4]}{1,223 \times P^2} \quad (P.1).$$

$$N_t = \frac{[(D_s - K_1)^2 \times \frac{\pi}{4} + K_2] - P [D_s - K_1] \times [K_3(n) + K_4]}{P^2} \quad (P.2)$$

waarin :

- | | | |
|----|---|-----|
| Nt | het aantal buizen in de warmtewisselaar | (/) |
| Ds | Inwendige diameter van de romp | m |
| s | De steekafstand | m |

n aantal 'tube passes'

(/)

De verschillende constanten zijn afhankelijk van de buisdiameter, de steekvorm en de steekafstand. In onderstaande tabel XXXX zijn deze constanten opgenomen.

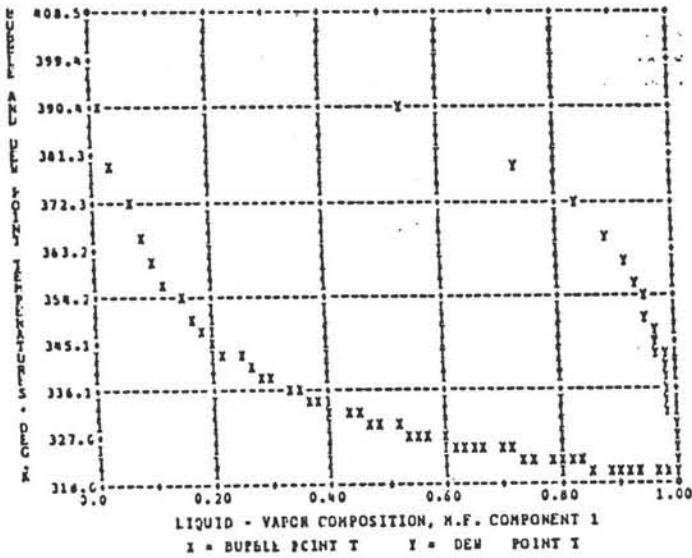
Buisdi. (m)	steekv. (/)	steekafst. (m)	K 1 (/)	K 2 (/)	K 3 (/)	K 4 (/)
3/4	driehoek	15/16	1.080	-0.90	0.690	-0.80
3/4	driehoek	1	1.080	-0.90	0.690	-0.80
3/4	vierkant	1	-1.040	-0.10	0.430	-0.25
1	driehoek	5/4	1.080	-0.90	0.690	-0.80
1	vierkant	5/4	-1.040	-0.10	0.430	-0.25

Deze buizencomputatie blijkt bij het narekenen met de bestaande 'tube layout' tabel niet zo nauwkeurig te zijn. Bij de berekening van de drie verdampers is uitgegaan van tabel XXXX, zodat deze nauwkeurigheid niet van belang is geweest voor onze berekeningen. Dit onderdeel is terug te vinden in het programma in subroutine "E" op de regels 2430 t/m 2460.

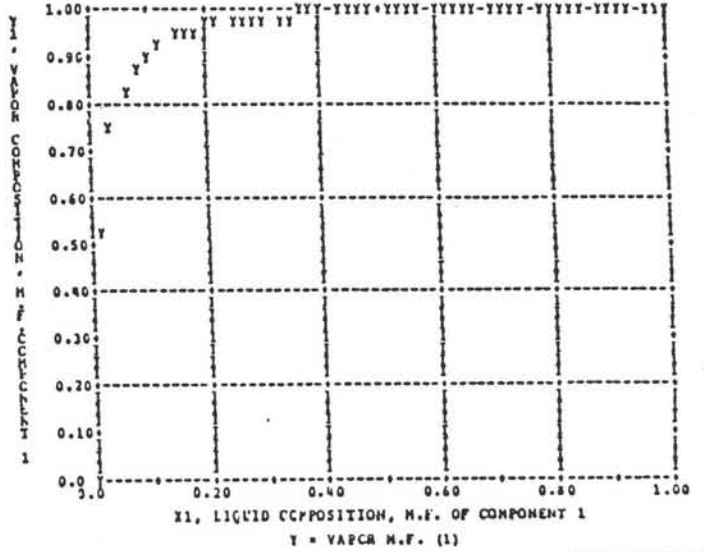
Appendix Q

FASENDIAGRAMEN BIJ VERSCHILLENDE DRUKKEN.

T-Y PLOT FOR BINARY PAIR - (1) WATER (2) EG
FROM BULK CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 10.000 KPA
KTYPE IS LACT - UNIFAC



T-Y PLOT FOR BINARY PAIR - (1) WATER (2) EG
FROM BULK CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 10.000 KPA
KTYPE IS LACT - UNIFAC



BULK CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 10.000 KPA
BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) EG

TEMP DEG C	MOLE FRACTION X(1)	MOLE FRACTION Y(1)	VLE K(1)	K(2)	ACTIVITY GAM1	COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
407.464	0.0	0.0	33.486	1.000	1.4449	0.000	0.371
399.4	0.0204	0.5310	26.263	0.478	1.4411	0.000	0.365
390.4	0.0408	0.7377	11.073	0.273	1.4311	0.000	0.353
381.3	0.0612	0.8813	10.000	0.180	1.4166	0.001	0.340
372.3	0.0816	0.9516	10.794	0.129	1.4088	0.001	0.326
363.2	0.1020	0.9813	7.934	0.098	1.3991	0.002	0.313
354.2	0.1224	0.9913	7.604	0.078	1.3901	0.003	0.300
345.1	0.1428	0.9948	7.155	0.064	1.3811	0.005	0.288
336.1	0.1632	0.9958	6.608	0.054	1.3722	0.008	0.276
327.0	0.1836	0.9948	6.064	0.048	1.3633	0.012	0.264
318.0	0.2040	0.9913	5.520	0.041	1.3544	0.018	0.252
310.0	0.2244	0.9848	5.076	0.036	1.3455	0.025	0.240
302.0	0.2448	0.9748	4.744	0.032	1.3366	0.035	0.228
294.0	0.2652	0.9613	4.512	0.029	1.3277	0.048	0.216
286.0	0.2856	0.9448	4.380	0.027	1.3188	0.065	0.204
278.0	0.3060	0.9248	4.348	0.026	1.3100	0.088	0.192
270.0	0.3264	0.9013	4.416	0.026	1.3011	0.118	0.180
262.0	0.3468	0.8748	4.584	0.027	1.2922	0.158	0.168
254.0	0.3672	0.8448	4.952	0.029	1.2833	0.210	0.156
246.0	0.3876	0.8113	5.620	0.032	1.2744	0.278	0.144
238.0	0.4080	0.7748	6.688	0.036	1.2655	0.368	0.132
230.0	0.4284	0.7348	8.156	0.041	1.2566	0.488	0.120
222.0	0.4488	0.6913	10.024	0.048	1.2477	0.648	0.108
214.0	0.4692	0.6448	12.292	0.058	1.2388	0.858	0.096
206.0	0.4896	0.5948	15.060	0.071	1.2300	1.128	0.084
198.0	0.5100	0.5413	18.328	0.088	1.2211	1.468	0.072
190.0	0.5304	0.4848	22.096	0.108	1.2122	1.888	0.060
182.0	0.5508	0.4248	26.464	0.131	1.2033	2.398	0.048
174.0	0.5712	0.3613	31.432	0.158	1.1944	2.998	0.036
166.0	0.5916	0.2948	37.100	0.189	1.1855	3.688	0.024
158.0	0.6120	0.2248	43.568	0.224	1.1766	4.468	0.012
150.0	0.6324	0.1513	50.836	0.264	1.1677	5.348	0.000
142.0	0.6528	0.0748	58.904	0.308	1.1588	6.328	0.000
134.0	0.6732	0.0048	67.772	0.358	1.1500	7.408	0.000
126.0	0.6936	0.0000	77.440	0.414	1.1411	8.588	0.000
118.0	0.7140	0.0000	87.908	0.476	1.1322	9.968	0.000
110.0	0.7344	0.0000	99.176	0.544	1.1233	11.548	0.000
102.0	0.7548	0.0000	111.244	0.618	1.1144	13.328	0.000
94.0	0.7752	0.0000	124.112	0.698	1.1055	15.308	0.000
86.0	0.7956	0.0000	137.780	0.784	1.0966	17.488	0.000
78.0	0.8160	0.0000	152.248	0.876	1.0877	19.868	0.000
70.0	0.8364	0.0000	167.516	0.984	1.0788	22.448	0.000
62.0	0.8568	0.0000	183.584	1.108	1.0700	25.228	0.000
54.0	0.8772	0.0000	200.352	1.248	1.0611	28.208	0.000
46.0	0.8976	0.0000	217.820	1.404	1.0522	31.388	0.000
38.0	0.9180	0.0000	235.988	1.576	1.0433	34.768	0.000
30.0	0.9384	0.0000	254.856	1.764	1.0344	38.348	0.000
22.0	0.9588	0.0000	274.424	1.968	1.0255	42.128	0.000
14.0	0.9792	0.0000	294.692	2.198	1.0166	46.108	0.000
6.0	0.9996	0.0000	315.660	2.454	1.0077	50.288	0.000
0.0	1.0000	1.0000	337.428	2.736	1.0000	54.668	0.000

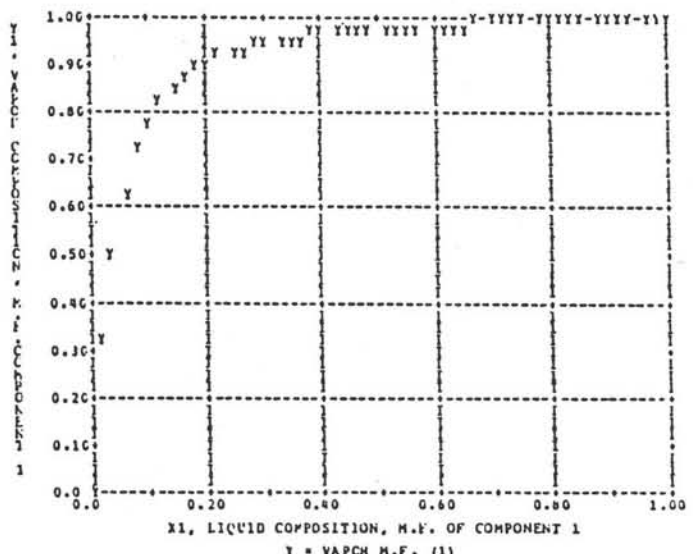
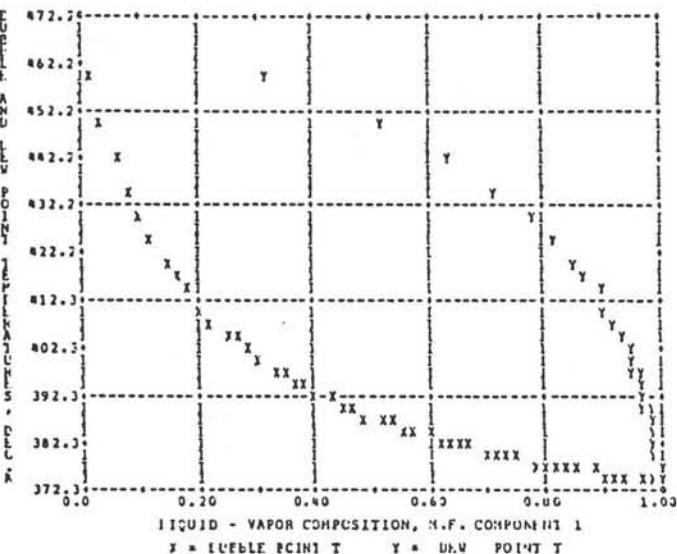
BULK CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 10.000 KPA
BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) EG

TEMP DEG C	VAPOR PRES (KPA)	PCYTING CORRECTION COMPI	PURE VAPOR COEFF COMPI	VLE K(1)	K(2)	ACTIVITY GAM1	COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
407.464	302.883	1.00000	0.9801	1.000	1.4449	0.000	0.371	
399.4	286.856	0.99999	0.9865	0.999	1.4411	0.000	0.365	
390.4	272.829	0.99998	0.9929	0.999	1.4311	0.000	0.353	
381.3	260.802	0.99997	0.9993	0.999	1.4166	0.001	0.340	
372.3	250.775	0.99996	0.9957	0.999	1.4088	0.001	0.326	
363.2	241.748	0.99995	0.9921	0.999	1.3991	0.002	0.313	
354.2	233.721	0.99994	0.9885	0.999	1.3901	0.003	0.300	
345.1	226.694	0.99993	0.9849	0.999	1.3811	0.005	0.288	
336.1	220.667	0.99992	0.9813	0.999	1.3722	0.008	0.276	
327.0	215.640	0.99991	0.9777	0.999	1.3633	0.012	0.264	
318.0	211.613	0.99990	0.9741	0.999	1.3544	0.018	0.252	
310.0	208.586	0.99989	0.9705	0.999	1.3455	0.025	0.240	
302.0	205.559	0.99988	0.9669	0.999	1.3366	0.035	0.228	
294.0	203.532	0.99987	0.9633	0.999	1.3277	0.048	0.216	
286.0	202.505	0.99986	0.9597	0.999	1.3188	0.065	0.204	
278.0	202.478	0.99985	0.9561	0.999	1.3100	0.088	0.192	
270.0	203.451	0.99984	0.9525	0.999	1.3011	0.118	0.180	
262.0	205.424	0.99983	0.9489	0.999	1.2922	0.158	0.168	
254.0	208.397	0.99982	0.9453	0.999	1.2833	0.210	0.156	
246.0	212.370	0.99981	0.9417	0.999	1.2744	0.278	0.144	
238.0	217.343	0.99980	0.9381	0.999	1.2655	0.368	0.132	
230.0	223.316	0.99979	0.9345	0.999	1.2566	0.488	0.120	
222.0	230.289	0.99978	0.9309	0.999	1.2477	0.648	0.108	
214.0	238.262	0.99977	0.9273	0.999	1.2388	0.858	0.096	
206.0	247.235	0.99976	0.9237	0.999	1.2300	1.128	0.084	
198.0	257.208	0.99975	0.9201	0.999	1.2211	1.468	0.072	
190.0	268.181	0.99974	0.9165	0.999	1.2122	1.888	0.060	
182.0	280.154	0.99973	0.9129	0.999	1.2033	2.398	0.048	
174.0	293.127	0.99972	0.9093	0.999	1.1944	2.998	0.036	
166.0	307.100	0.99971	0.9057	0.999	1.1855	3.688	0.024	
158.0	322.073	0.99970	0.9021	0.999	1.1766	4.468	0.012	
150.0	338.046	0.99969	0.8985	0.999	1.1677	5.348	0.000	
142.0	355.019	0.99968	0.8949	0.999	1.1588	6.328	0.000	
134.0	373.992	0.99967	0.8913	0.999	1.1500	7.408	0.000	
126.0	394.965	0.99966	0.8877	0.999	1.1411	8.588	0.000	
118.0	417.938	0.99965	0.8841	0.999	1.1322	9.968	0.000	
110.0	442.911	0.99964	0.8805	0.999	1.1233	11.548	0.000	
102.0	469.884	0.99963	0.8769	0.999	1.1144	13.328	0.000	
94.0	508.857	0.99962	0.8733	0.999	1.1055	15.308	0.000	
86.0	559.830	0.99961	0.8697	0.999	1.0966	17.488	0.000	
78.0	623.803	0.99960	0.8661	0.999	1.0877	19.868	0.000	
70.0	701.776	0.99959	0.8625	0.999	1.0788	22.448	0.000	
62.0	794.749	0.99958	0.8589	0.999	1.0700	25.228	0.000	
54.0	902.722	0.99957	0.8553	0.999	1.0611	28.208	0.000	
46.0	1026.695	0.99956	0.8517	0.999	1.0522	31.388	0.000	
38.0	1166.668	0.99955	0.8481	0.999	1.0433	34.768	0.000	
30.0	1324.641	0.99954	0.8445	0.999	1.0344	38.348	0.000	
22.0	1500.614	0.99953	0.8409	0.999	1.0255	42.128	0.000	
14.0	1694.587	0.99952	0.8373	0.999	1.0166	46.108	0.000	
6.0	1906.560	0.99951	0.8337	0.999	1.0077	50.288	0.000	
0.0	2136.533	0.99950	0.8301	0.999	1.0000	54.668	0.000	

Bijlage Q.1 : Fasendiagram bij een druk van 10 kPa.

1-3-Y PLOT FOR BINARY PAIR- (1) WATER / (2) LG
FROM BVE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 102.000 KPA
KIYFE IS LACT - UNIFAC

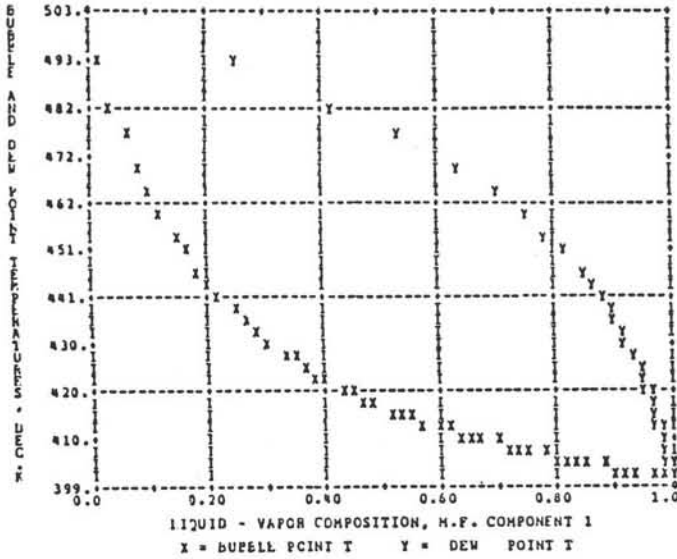
X-Y PLOT FOR BINARY PAIR- (1) WATER / (2) LG
FROM BVE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 102.000 KPA
KIYFE IS LACT - UNIFAC



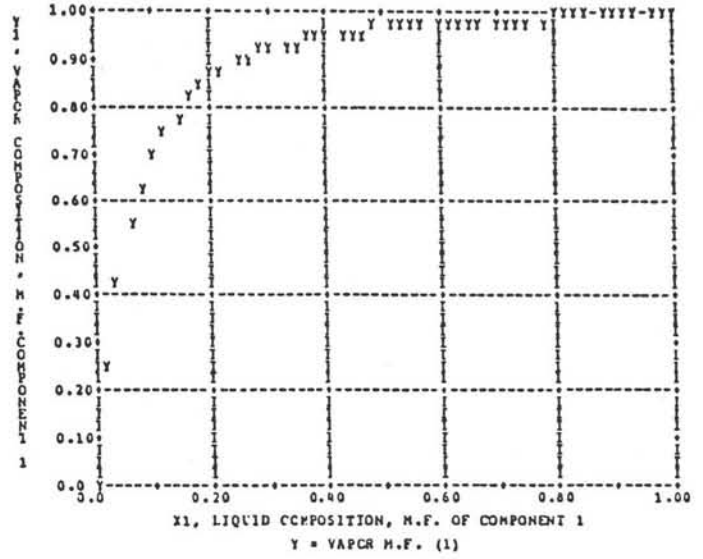
BVE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 102.000 KPA
BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) LG

T/DP D/C K	MOL FRACTION Y (1)	FRACTION Y (1)	VLE K-VALUE K (1)	K (2)	ACTIVITY GAM1	COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
471.167	0.0	0.0	1.611	1.000	1.449	1.000	0.371
455.119	0.0709	0.5107	1.446	0.699	1.441	1.000	0.368
455.081	0.0478	0.5107	1.458	0.511	1.433	1.000	0.360
445.166	0.0212	0.5107	1.375	0.389	1.425	1.001	0.353
445.126	0.0181	0.5107	1.366	0.306	1.416	1.001	0.349
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.248	1.408	1.002	0.343
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.206	1.399	1.002	0.339
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.175	1.390	1.003	0.326
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.153	1.381	1.005	0.318
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.131	1.372	1.008	0.310
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.109	1.363	1.010	0.302
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.087	1.354	1.012	0.294
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.065	1.345	1.014	0.286
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.043	1.336	1.016	0.278
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.021	1.327	1.018	0.270
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.318	1.020	0.262
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.309	1.022	0.254
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.300	1.024	0.246
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.291	1.026	0.238
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.282	1.028	0.230
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.273	1.030	0.222
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.264	1.032	0.214
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.255	1.034	0.206
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.246	1.036	0.198
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.237	1.038	0.190
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.228	1.040	0.182
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.219	1.042	0.174
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.210	1.044	0.166
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.201	1.046	0.158
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.192	1.048	0.150
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.183	1.050	0.142
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.174	1.052	0.134
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.165	1.054	0.126
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.156	1.056	0.118
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.147	1.058	0.110
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.138	1.060	0.102
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.129	1.062	0.094
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.120	1.064	0.086
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.111	1.066	0.078
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.102	1.068	0.070
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.093	1.070	0.062
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.084	1.072	0.054
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.075	1.074	0.046
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.066	1.076	0.038
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.057	1.078	0.030
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.048	1.080	0.022
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.039	1.082	0.014
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.030	1.084	0.006
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.021	1.086	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.012	1.088	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	1.003	1.090	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.994	1.092	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.985	1.094	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.976	1.096	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.967	1.098	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.958	1.100	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.949	1.102	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.940	1.104	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.931	1.106	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.922	1.108	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.913	1.110	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.904	1.112	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.895	1.114	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.886	1.116	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.877	1.118	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.868	1.120	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.859	1.122	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.850	1.124	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.841	1.126	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.832	1.128	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.823	1.130	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.814	1.132	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.805	1.134	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.796	1.136	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.787	1.138	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.778	1.140	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.769	1.142	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.760	1.144	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.751	1.146	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.742	1.148	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.733	1.150	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.724	1.152	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.715	1.154	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.706	1.156	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.697	1.158	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.688	1.160	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.679	1.162	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.670	1.164	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.661	1.166	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.652	1.168	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.643	1.170	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.634	1.172	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.625	1.174	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.616	1.176	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.607	1.178	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.598	1.180	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.589	1.182	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.580	1.184	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.571	1.186	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.562	1.188	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.553	1.190	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.544	1.192	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.535	1.194	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.526	1.196	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.517	1.198	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.508	1.200	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.499	1.202	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.490	1.204	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.481	1.206	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.472	1.208	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.463	1.210	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.454	1.212	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.445	1.214	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.436	1.216	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.427	1.218	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.418	1.220	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.409	1.222	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.400	1.224	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.391	1.226	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.382	1.228	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.373	1.230	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.364	1.232	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.355	1.234	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.346	1.236	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.337	1.238	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.328	1.240	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.319	1.242	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.310	1.244	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.301	1.246	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.292	1.248	0.000
445.119	0.0200	0.5107	1.375	0.000	0.283	1.250	0.000
445.119	0.						

1-Y-Y PLOT FOR BINARY PAIR- (1) WATER / (2) EG
FROM BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 247.000 KPA
RYTPE IS LACT - UNIFAC



1-Y-Y PLOT FOR BINARY PAIR- (1) WATER / (2) EG
FROM BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 247.000 KPA
RYTPE IS LACT - UNIFAC



BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 247.000 KPA
BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) EG

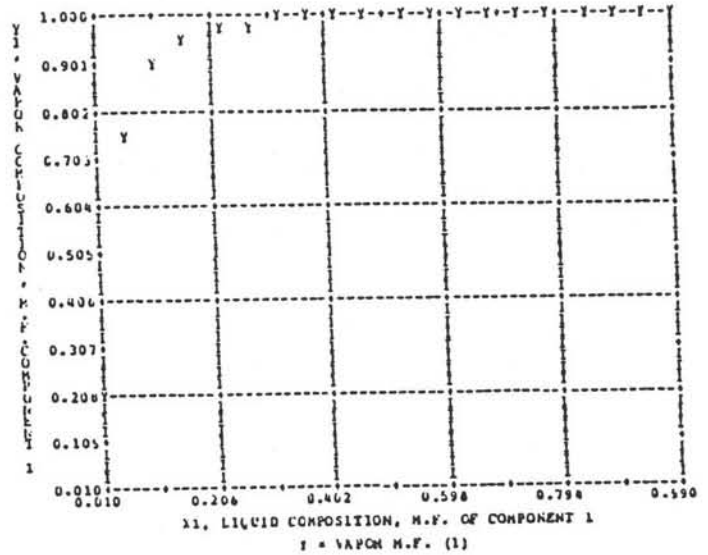
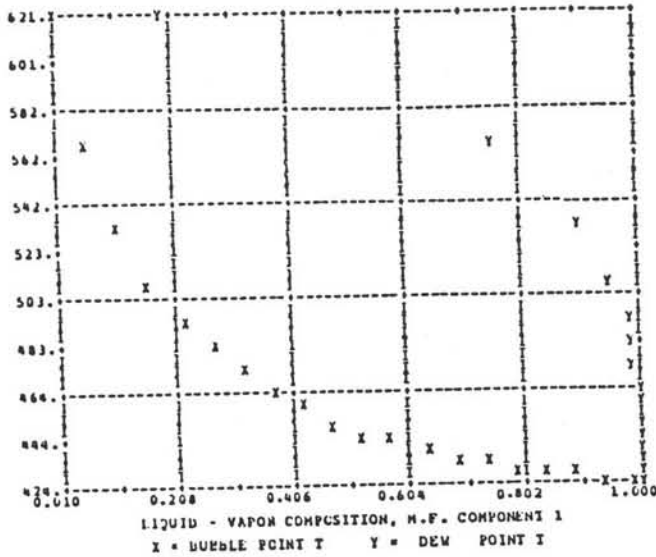
TEMP DEG K	MOLE FRACTION X(1)	MOLE FRACTION Y(1)	VLE K(1)	VLE K(2)	ACTIVITY GAM1	COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
27	0.0000	0.0000	14.235	1.000	1.449	1.000	0.371
28	0.0204	0.7447	11.993	0.771	1.441	1.000	0.365
29	0.0408	0.4173	10.224	0.607	1.433	1.000	0.360
30	0.0612	0.5477	8.831	0.489	1.425	1.001	0.353
31	0.0816	0.6305	7.771	0.403	1.416	1.001	0.347
32	0.1020	0.6893	6.833	0.337	1.408	1.002	0.340
33	0.1224	0.7479	6.108	0.287	1.399	1.002	0.333
34	0.1428	0.7872	5.510	0.248	1.390	1.003	0.326
35	0.1632	0.8181	5.011	0.217	1.381	1.005	0.318
36	0.1836	0.8425	4.603	0.193	1.372	1.006	0.310
37	0.2040	0.8629	4.228	0.172	1.362	1.008	0.302
38	0.2244	0.8794	3.891	0.155	1.353	1.010	0.293
39	0.2448	0.8932	3.594	0.141	1.343	1.012	0.283
40	0.2652	0.9046	3.340	0.130	1.334	1.014	0.274
41	0.2856	0.9147	3.121	0.122	1.324	1.017	0.263
42	0.3060	0.9231	2.916	0.117	1.314	1.020	0.253
43	0.3264	0.9304	2.724	0.113	1.304	1.024	0.243
44	0.3468	0.9368	2.543	0.109	1.293	1.028	0.232
45	0.3672	0.9423	2.373	0.106	1.283	1.033	0.221
46	0.3876	0.9472	2.214	0.103	1.272	1.038	0.210
47	0.4080	0.9518	2.066	0.101	1.261	1.044	0.199
48	0.4284	0.9561	1.928	0.099	1.251	1.050	0.187
49	0.4488	0.9599	1.799	0.097	1.241	1.057	0.175
50	0.4692	0.9643	1.679	0.096	1.230	1.064	0.162
51	0.4896	0.9683	1.568	0.095	1.219	1.074	0.147
52	0.5100	0.9720	1.466	0.094	1.208	1.083	0.129
53	0.5304	0.9754	1.373	0.093	1.197	1.094	0.109
54	0.5508	0.9785	1.289	0.092	1.186	1.106	0.090
55	0.5712	0.9813	1.214	0.091	1.175	1.119	0.070
56	0.5916	0.9839	1.147	0.090	1.164	1.134	0.050
57	0.6120	0.9862	1.088	0.089	1.153	1.150	0.030
58	0.6324	0.9882	1.036	0.088	1.142	1.167	0.010
59	0.6528	0.9899	0.991	0.087	1.131	1.185	-0.010
60	0.6732	0.9913	0.952	0.086	1.120	1.204	-0.030
61	0.6936	0.9924	0.919	0.085	1.109	1.224	-0.050
62	0.7140	0.9932	0.891	0.084	1.098	1.245	-0.070
63	0.7344	0.9938	0.867	0.083	1.087	1.266	-0.090
64	0.7548	0.9941	0.846	0.082	1.076	1.288	-0.110
65	0.7752	0.9943	0.827	0.081	1.065	1.311	-0.130
66	0.7956	0.9944	0.810	0.080	1.054	1.335	-0.150
67	0.8160	0.9945	0.794	0.079	1.043	1.360	-0.170
68	0.8364	0.9945	0.780	0.078	1.032	1.386	-0.190
69	0.8568	0.9945	0.767	0.077	1.021	1.413	-0.210
70	0.8772	0.9945	0.755	0.076	1.010	1.441	-0.230
71	0.8976	0.9944	0.744	0.075	1.000	1.470	-0.250
72	0.9180	0.9943	0.734	0.074	0.990	1.500	-0.270
73	0.9384	0.9941	0.724	0.073	0.980	1.531	-0.290
74	0.9588	0.9938	0.715	0.072	0.970	1.563	-0.310
75	0.9792	0.9934	0.706	0.071	0.960	1.596	-0.330
76	0.9996	0.9929	0.697	0.070	0.950	1.631	-0.350
77	1.0000	0.9923	0.688	0.069	0.940	1.667	-0.370

BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 247.000 KPA
BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) EG

TEMP DEG K	VAPOR PHES COMP1	VAPOR PHES COMP2	PYNITNG CORRECT COM1	PYNITNG CORRECT COM2	PURE VP FUG COM1	PURE VP FUG COM2	COMP COEFF COM1	COMP COEFF COM2	VAPOR COEFF COM1	VAPOR COEFF COM2
27	0.0000	0.9999	0.0000	0.9999	0.9019	0.9517	1.0107	0.9517	0.9517	0.9517
28	0.9911	0.0089	0.0008	0.9992	0.9153	0.9605	1.0024	0.9498	0.9498	0.9498
29	0.9929	0.0071	0.0014	0.9986	0.9222	0.9672	0.9975	0.9486	0.9486	0.9486
30	0.9936	0.0064	0.0018	0.9980	0.9322	0.9723	0.9945	0.9484	0.9484	0.9484
31	0.9945	0.0055	0.0022	0.9974	0.9384	0.9762	0.9925	0.9484	0.9484	0.9484
32	0.9952	0.0048	0.0024	0.9968	0.9415	0.9791	0.9912	0.9483	0.9483	0.9483
33	0.9958	0.0041	0.0026	0.9962	0.9478	0.9818	0.9902	0.9482	0.9482	0.9482
34	0.9963	0.0036	0.0028	0.9957	0.9515	0.9838	0.9898	0.9482	0.9482	0.9482
35	0.9967	0.0031	0.0029	0.9952	0.9546	0.9854	0.9888	0.9481	0.9481	0.9481
36	0.9970	0.0027	0.0031	0.9947	0.9573	0.9868	0.9883	0.9475	0.9475	0.9475
37	0.9972	0.0024	0.0032	0.9942	0.9597	0.9879	0.9879	0.9472	0.9472	0.9472
38	0.9974	0.0021	0.0033	0.9937	0.9617	0.9889	0.9876	0.9470	0.9470	0.9470
39	0.9975	0.0019	0.0034	0.9932	0.9636	0.9898	0.9874	0.9465	0.9465	0.9465
40	0.9976	0.0017	0.0034	0.9928	0.9652	0.9905	0.9870	0.9461	0.9461	0.9461
41	0.9976	0.0016	0.0034	0.9924	0.9666	0.9911	0.9866	0.9457	0.9457	0.9457
42	0.9976	0.0015	0.0034	0.9920	0.9679	0.9917	0.9861	0.9454	0.9454	0.9454
43	0.9976	0.0014	0.0034	0.9917	0.9691	0.9921	0.9857	0.9450	0.9450	0.9450
44	0.9976	0.0013	0.0034	0.9914	0.9702	0.9924	0.9853	0.9446	0.9446	0.9446
45	0.9976	0.0012	0.0034	0.9911	0.9711	0.9926	0.9850	0.9442	0.9442	0.9442
46	0.9976	0.0011	0.0034	0.9908	0.9719	0.9927	0.9848	0.9439	0.9439	0.9439
47	0.9976	0.0010	0.0034	0.9905	0.9726	0.9928	0.9846	0.9435	0.9435	0.9435
48	0.9976	0.0009	0.0034	0.9902	0.9732	0.9928	0.9844	0.9432	0.9432	0.9432
49	0.9976	0.0008	0.0034	0.9900	0.9737	0.9928	0.9843	0.9429	0.9429	0.9429
50	0.9976	0.0007	0.0034	0.9898	0.9741	0.9928	0.9842	0.9426	0.9426	0.9426
51	0.9976	0.0006	0.0034	0.9896	0.9745	0.9928	0.9841	0.9423	0.9423	0.9423
52	0.9976	0.0005	0.0034	0.9894	0.9748	0.9928	0.9840	0.9420	0.9420	0.9420
53	0.9976	0.0004	0.0034	0.9892	0.9751	0.9928	0.9839	0.9417	0.9417	0.9417
54	0.9976	0.0003	0.0034	0.9890	0.9754	0.9928	0.9838	0.9414	0.9414	0.9414
55	0.9976	0.0002	0.0034	0.9888	0.9756	0.9928	0.9837	0.9411	0.9411	0.9411
56	0.9976	0.0001	0.0034	0.9886	0.9758	0.9928	0.9836	0.9408	0.9408	0.9408
57	0.9976	0.0000	0.0034	0.9884	0.9760	0.9928	0.9835	0.9405	0.9405	0.9405
58	0.9976	0.0000	0.0034	0.9882	0.9762	0.9928	0.9834	0.9402	0.9402	0.9402
59	0.9976	0.0000	0.0034	0.9880	0.9764	0.9928	0.9833	0.9400	0.9400	0.9400
60	0.9976	0.0000	0.0034	0.9878	0.9766	0.9928	0.9832	0.9397	0.9397	0.9397
61	0.9976	0.0000	0.0034	0.9876	0.9768	0.9928	0.9831	0.9395	0.9395	0.9395
62	0.9976	0.0000	0.0034	0.9874	0.9770	0.9928	0.9830	0.9393	0.9393	0.9393
63	0.9976	0.0000	0.0034	0.9872	0.9772	0.9928	0.9829	0.9391	0.9391	0.9391
64	0.9976	0.0000	0.0034	0.9870	0.9774	0.9928	0.9828	0.9389	0.9389	0.9389
65	0.9976	0.0000	0.0034	0.9868	0.9776	0.9928	0.9827	0.9387	0.9387	0.9387
66	0.9976	0.0000	0.0034	0.9866	0.9778	0.9928	0.9826	0.9385	0.9385	0.9385
67	0.9976	0.0000	0.0034	0.9864	0.9780	0.9928	0.9825	0.9383	0.9383	0.9383
68	0.9976	0.0000	0.0034	0.9862	0.9782	0.9928	0.9824	0.9381	0.9381	0.9381
69	0.9976	0.0000	0.0034	0.9860	0.9784	0.9928	0.9823	0.9379	0.9379	0.9379
70	0.9976	0.0000	0.0034	0.9858	0.9786	0.9928	0.9822	0.9377	0.9377	0.9377
71	0.9976	0.0000	0.0034	0.9856	0.9788	0.9928	0.9821	0.9375	0.9375	0.9375
72	0.9976	0.0000	0.0034	0.9854	0.9790	0.9928	0.9820	0.9373	0.9373	0.9373
73	0.9976	0.0000	0.0034	0.9852	0.9792	0.9928	0.9819	0.9371	0.9371	0.9371
74	0.9976	0.0000	0.0034	0.9850	0.9794	0.9928	0.9818	0.9369	0.9369	0.9369
75	0.9976	0.0000	0.0034	0.9848	0.9796	0.9928	0.9817	0.9367	0.9367	0.9367
76	0.9976	0.0000	0.0034	0.9846	0.9798	0.9928	0.9816	0.9365	0.9365	0.9365
77	0.9976	0.0000	0.0034	0.9844	0.9800	0.9928	0.9815	0.9363	0.9363	0.9363
78	0.9976	0.0000	0.0034	0.9842	0.9802	0.9928	0.9814	0.9361	0.9361	0.9361
79	0.9976	0.0000	0.0034	0.9840	0.9804	0.9928	0.9813	0.9359	0.9359	0.9359
80	0.9976	0.0000	0.0034	0.9838	0.9806	0.9928	0.9812	0.9357	0.9357	0.9357
81	0.9976	0.0000	0.0034	0.9836	0.9808	0.9928	0.9811	0.9355	0.9355	0.9355
82	0.9976	0.0000	0.0034	0.9834	0.9810	0.9928	0.9810	0.9353	0.9353	0.9353
83	0.9976	0.0000	0.0034	0.9832	0.9812	0.9928	0.9809	0.9351	0.9351	0.9351
84	0.9976	0.0000	0.0034	0.9830	0.9814	0.9928	0.9808	0.9349	0.9349	0.9349</

1-1-Y PLG1 FOR BINARY PAIR - (1) WATER / (2) TEG
 FROM BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 500.000 KPA
 KIYPE 15 LACT - UNIFAC

X-Y PLG1 FOR BINARY PAIR - (1) WATER / (2) TEG
 FROM BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 500.000 KPA
 KIYPE 15 LACT - UNIFAC



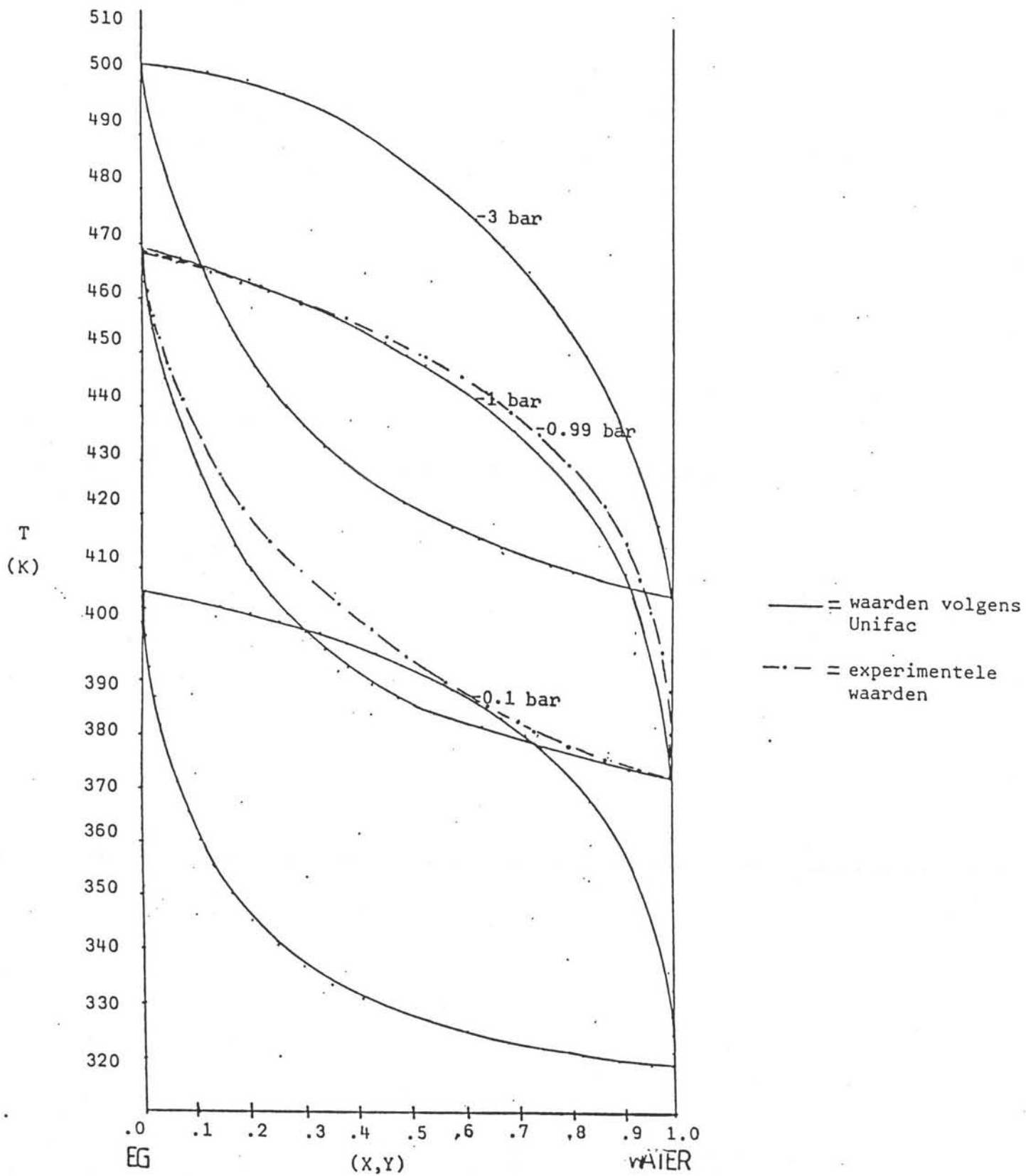
BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 500.000 KPA
 BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) TEG

	TEMP DEG K	LIQ X(1)	VAPOR Y(1)	VLK K(1)	K-VALUE K(2)	ACTIVITY COEFF GAM1	ACTIVITY COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
1	614.802	0.0100	0.1978	19.778	0.810	0.991	1.000	-0.061
2	567.922	0.0112	0.1512	14.260	0.759	0.970	0.999	-0.035
3	516.036	0.0124	0.1047	10.801	0.694	0.949	0.998	-0.002
4	463.728	0.0136	0.0763	8.059	0.627	0.928	0.997	0.028
5	411.238	0.0147	0.0553	6.053	0.559	0.907	0.996	0.073
6	358.730	0.0158	0.0399	4.599	0.487	0.886	0.995	0.119
7	306.261	0.0169	0.0288	3.555	0.414	0.865	0.994	0.164
8	253.782	0.0180	0.0208	2.729	0.341	0.844	0.993	0.209
9	201.303	0.0191	0.0154	2.077	0.272	0.823	0.992	0.254
10	148.824	0.0202	0.0113	1.588	0.210	0.802	0.991	0.299
11	96.345	0.0213	0.0080	1.199	0.154	0.781	0.990	0.344
12	43.866	0.0224	0.0055	0.877	0.103	0.760	0.989	0.389
13	422.329	0.0235	0.0038	0.615	0.063	0.739	0.988	0.434
14	422.329	0.0246	0.0027	0.429	0.033	0.718	0.987	0.479
15	422.329	0.0257	0.0019	0.295	0.020	0.697	0.986	0.524
16	422.329	0.0268	0.0013	0.195	0.012	0.676	0.985	0.569
17	422.329	0.0279	0.0009	0.132	0.007	0.655	0.984	0.614
18	422.329	0.0290	0.0006	0.090	0.004	0.634	0.983	0.659
19	422.329	0.0301	0.0004	0.061	0.003	0.613	0.982	0.704
20	422.329	0.0312	0.0003	0.041	0.002	0.592	0.981	0.749

BVLE CALCULATION AT CONSTANT PRES OF 500.000 KPA
 BINARY PAIR IS (1) WATER / (2) TEG

	TEMP DEG K	VAPOR X(1)	LIQ Y(1)	VLK K(1)	K-VALUE K(2)	ACTIVITY COEFF GAM1	ACTIVITY COEFF GAM2	LN OF GAM1/GAM2
1	614.802	0.0100	0.1978	19.778	0.810	0.991	1.000	-0.061
2	567.922	0.0112	0.1512	14.260	0.759	0.970	0.999	-0.035
3	516.036	0.0124	0.1047	10.801	0.694	0.949	0.998	-0.002
4	463.728	0.0136	0.0763	8.059	0.627	0.928	0.997	0.028
5	411.238	0.0147	0.0553	6.053	0.559	0.907	0.996	0.073
6	358.730	0.0158	0.0399	4.599	0.487	0.886	0.995	0.119
7	306.261	0.0169	0.0288	3.555	0.414	0.865	0.994	0.164
8	253.782	0.0180	0.0208	2.729	0.341	0.844	0.993	0.209
9	201.303	0.0191	0.0154	2.077	0.272	0.823	0.992	0.254
10	148.824	0.0202	0.0113	1.588	0.210	0.802	0.991	0.299
11	96.345	0.0213	0.0080	1.199	0.154	0.781	0.990	0.344
12	43.866	0.0224	0.0055	0.877	0.103	0.760	0.989	0.389
13	422.329	0.0235	0.0038	0.615	0.063	0.739	0.988	0.434
14	422.329	0.0246	0.0027	0.429	0.033	0.718	0.987	0.479
15	422.329	0.0257	0.0019	0.295	0.020	0.697	0.986	0.524
16	422.329	0.0268	0.0013	0.195	0.012	0.676	0.985	0.569
17	422.329	0.0279	0.0009	0.132	0.007	0.655	0.984	0.614
18	422.329	0.0290	0.0006	0.090	0.004	0.634	0.983	0.659
19	422.329	0.0301	0.0004	0.061	0.003	0.613	0.982	0.704
20	422.329	0.0312	0.0003	0.041	0.002	0.592	0.981	0.749

Bijlage Q.4: Fasendiagram bij een druk van 500 kPa.



Figuur R1 : T, XY diagram voor water-EG bij verschillende drukken.

Appendix R
THERMODYNAMICA.

De evenwichtsconstante voor de beschrijving van het gas-vloeistof evenwicht van het quaternaire mengsel water/EG/DEG/TEG is als volgt geformuleerd:

$$K = \frac{y}{x} = \frac{\gamma_i \cdot p_i \cdot \phi_i \cdot \exp\left(\frac{(t(\pi - P) v_i^L}{RT}\right)}{\pi \phi_i}$$

Hierin is:

- γ_i = activiteitscoëfficiënt van component i
- p_i = dampdruk van zuivere component i
- ϕ_i = fugaciteit van pure component i bij P en T
- $\frac{P}{V}$ = systeem druk
- R = gasconstante
- T = systeem temperatuur
- ϕ_i^L = damp fugaciteitscoëfficiënt van component i
- v_i^L = molaire vloeistof volume van component i

Zowel γ_i als ϕ_i (de fugaciteitscoëfficiënten) zijn berekend via de formule:

$$RT \ln \frac{f_i(p, T, x)}{p x_i} = - \int_0^V \left(\frac{\delta p}{\delta n_i} \right)_{V, T, \hat{n}_i} - \frac{RT}{V} dV + RT \ln \frac{\sum_i n_i RT}{pV}$$

De afleiding van deze formule voert te ver en is te vinden in het collegedictaat Toegepaste Thermo blz 115-116[18]. Voor de beschrijving van $\delta p / \delta n_i$ is gebruik gemaakt van de toestandsvergelijking van Soave-Redlich-Kwong:

$$\left(P + \frac{a(T)}{V(V+b)} \right) (V-b) = RT \quad \text{hierin zijn:}$$

$$R \quad T \quad \quad \quad 2 \quad \quad 0,5 \quad 2$$

$$a(T) = 0,42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} (1 + (0,480 + 1,574\omega_c - 0,176\omega_c^2) (1 - T/T_c)^{1/2})^2$$

$$b = 0,08664 \frac{RT_c}{P_c}$$

$$T_c = \left(\frac{a}{b} \frac{0,08664}{0,42748} \frac{1}{2} \right)^{2/3}$$

$$P_c = \left(\frac{0,08664}{b} \right)^5 \left(\frac{a}{0,42748} \right)^2 R^{1/3}$$

Voor de beschrijving van de constanten a(T) en b verwijzen we naar [18] blz 70 en blz 73. Voor de berekening van de activiteitscoëfficiënten (γ_i 's) is gebruik gemaakt van de groepsbijdrage methode UNIFAC.

In de UNIFAC methode wordt de activiteitscoëfficiënt gesplitst in een combinatorische bijdrage (γ_i^c) die samenhangt met de vorm en de grootte van de moleculen als geheel en van de restterm die bepaald wordt door de wisselwerking tussen de verschillende groepen waaruit de moleculen opgebouwd gedacht worden. In formule vorm:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R$$

Hoe γ_i^c en γ_i^R precies berekend worden is te vinden in [18] blz 179-180.

Voor de UNIFAC berekeningen zijn de verschillende moleculen als volgt gedeeld in functionele groepen:

- water H₂O
- EG HO-C-C-OH
- DEG -O-CH₂-CH₂-OH -OH en 2* -CH₂
- TEG 2* -O-CH₂-CH₂-OH en 2* -CH₂

De voor de berekening van en benodigde parameters R_k en Q_k (een oppervlakte en een volume parameter) en de interactieparameter a werden gevonden in de interne bibliotheek van de computer simulatie taal PROCESS en op blz 182 en 183 van het dictaat [18].

Met behulp van PROCESS is volgens de hierboven beschreven vergelijkingen het fase evenwicht uitgerekend voor een aantal temperaturen en drukken. Zie hiervoor figuur R.J. Uit deze berekeningen bleek dat bij lage druk het gas-vloeistof gebied breder werd. Dit wil zeggen dat bij een temperatuur de damp- en de vloeistoflijnen verder uit elkaar liggen. De samenstelling van

damp en vloeistof liggen dus bij lage druk het verst uit elkaar, waardoor een goede scheiding mogelijk wordt.

Wel moet in acht genomen worden dat de beschrijving van de thermodynamica niet perfect is. Dit is te zien in de vergelijking tussen de lijn met experimentele data, gevonden in de Critical Tables, en de berekende lijn.

Doordat de experimentele gegevens steeds bij een aantal drukken bekend waren en voor de berekening van de fasenevenwichten een continu model vereist was, is toch gekozen om van het hier beschreven K-model gebruik te maken.

Appendix S

SIMULATIE PROGRAMMA VAN DESTILLATIE (PROCESS).

```

PROCESSSM INPUT LISTING - PAGE 1
TITLE PROBLEM=WADDEST,PROJECT=G,USER=GG2,DATE=FEB 87
DIMENSION S1
CAIC NOTRIAL=50
COMPONENT DATA
  LIPID 1,WATER/2,EG/3,DEG/4,TEG
GRCUF 3844,2.52,2.5927
THEFMDATA
TYPE KTYF=LACT
KSEL SEINO=1,SRKVFUG
UNIFAC
STREAM DATA
PRCF STRM=1,FRESS=45.0,RATE(M)=379.5,TEMP=352,*
COMP=1,61.3/2,301.3/3,16.87/4,0
NAME 1,LIC FEED/2,DEST/3,BOTTOM
UNIT OPERATICN DATA
SPECIFIC NAME=G,UID=D1
FEED=1
PRCD STRM=2,FATE(M)=56.9
PRCF STRM=3
SPEC STRM=3,CCMP=1,FRACTION=C.0010
SPEC STRM=2,CCMP=2,FRACTION=C.0050
CONDENSOR TYPE=3
CALCULATION KEYL=1,KEYH=2,RRMIN=1.25,MODEL=1
END
  
```

```

SUMMARY OF UNDERWOOD CALCULATIONS
MINIMUM REFLUX RATIO 0.14976
FEED CONDITION Q 1.10603
FENSKE MINIMUM TRAYS 3.40282
  
```

OPERATING REFLUX RATIO 1.25* R-MINIMUM

ICTAL TRAYS	FEED TRAY	R/R-MIN	M/M-MIN	REFLUX RATIO	DUTY, MM KJ /HR CONDENSER	KJ /HR REBOILER
16	8	1.125	4.741	0.168	-3.002E+00	9.251E+00
12	6	1.188	3.584	0.178	-3.026E+00	9.275E+00
11	6	1.250	3.255	0.187	-3.050E+00	9.299E+00
10	5	1.313	3.047	0.197	-3.074E+00	9.323E+00
10	5	1.375	2.864	0.206	-3.098E+00	9.347E+00

TRAYS ABOVE DO NOT INCLUDE ICTAL/SUBCOOLED CONDENSER

condensor		1.1	1.2	2.1	2.2	3.1	3.2
condensor duty	W	$5827 \cdot 10^3$	$1126 \cdot 10^3$	$1177 \cdot 10^3$	$270 \cdot 10^3$	$208 \cdot 10^3$	$33 \cdot 10^3$
kondensatie temp	°C	156	121	151	120	137	125
koelwater inlaat temp	°C	23	23	23	23	23	23
koelwater uitlaat temp	°C	30	30	30	30	30	30
overall warmteoverdracht coefficient	W/m ² K	483	483	483	483	483	483
logaritmisch temp verschil	°C	129.5	94.5	124.5	93.5	110.5	98.5
V.O.	m ²	108.0	28.4	22.5	6.9	4.5	0.8
massastroom koelwater	Kg/s	198.9	38.4	40.2	9.2	7.2	1.1

tabel T.1. Condensor gepakte kolommen.

Appendix T

BEREKENINGSMETHODE CONDENSOR.

De berekening van de condensor is gebaseerd op het college-dictaat [11]. Het gaat om een eenvoudige berekening die een indicatie geeft van het benodigde oppervlak van de condensor en van de benodigde hoeveelheid koelwater.

Het Verwarmd Oppervlak (V.O) wordt berekend met:

$$V.O. = \frac{Q}{K_u \cdot T_{ln}}$$

Q = warmtestroom (W)

K_u = totale warmteoverdrachts coefficient (W/m²·K)

T_{ln} = logaritmisches temperatuurverschil (°C)

$$T_{ln} = \frac{T_{max} - T_{min}}{\ln(T_{max} / T_{min})}$$

T_{max} = maximum temp verschil tussen koelwater en condensaat

T_{min} = minimum temp verschil tussen koelwater en condensaat

Het V.O. wordt hierna 15 % overgedimensioneerd.

De totale benodigde hoeveelheid koelwater wordt berekend met:

$$M = \frac{Q}{C_p \cdot T}$$

C_p = soortelijke warmte koelwater (J/Kg·K)

T = temperatuur verschil tussen in en uitgaand koelwater (°C)

M = massastroom koelwater (Kg/s)

In tabel T.1 zijn de resultaten weergegeven.

reboiler		1.1
reboiler duty	W	5526.10 ³
stoomdruk	bar	19
stoomtemperatuur	°C	330
stoom condensatie temperatuur	°C	210
bodemtemperatuur	°C	174
kolom logaritmisch temp verschil	°C	81.8
condensatie temp verschil	°C	36
overall warmte over- dracht coefficient	W/m ² K	850
V.O.	m ²	208
massastroom stoom	Kg/s	2.52
aantal pijpen		474
drukval over reboiler	mbar	60
snelheid medium	m/s	10
lengte reboiler	m	4.38

tabel 4.1. Thermosyphon reboiler

Appendix U

DE THERMOSYPHON REBOILER.

De berekeningsmethode van de thermosyphon reboiler is gebaseerd op het collegedictaat I 20 deel 3. [11] en op Kern [15] De berekeningsmethode is te vinden in hoofdstuk De thermosyphon is berekend voor kolom 1.1 (gepakt) Voor de totale warmteoverdrachts coefficient is 850 W/m² K genomen volgens tabel 2 [11]. Voor de snelheid van het medium in de thermosyphon is 10 m/s genomen en voor de pijpdiameter is 1 1/4 inch genomen. Voor de resultaten zie tabel u.1.

Appendix V

BEREKENINGSMETHODE VACUUMPOMPEN.

Er is er vanuitgegaan dat het vacuüm gecreeerd wordt met stoomejectoren. Er wordt gerekend met een viertrapsejector. Deze ejectoren kunnen het volgende vacuüm creeren.

1 ste trap	7900	(N/m ²) abs
2 e trap	1300	(N/m ²)
3 e trap	165	(N/m ²)
4 e trap	30	(N/m ²)

De snelheid van het vacuümsysteem (S_o) wordt bepaald met de volgende hulpregel: De kolommen moeten in twee uur op hun gespecificeerd vacuüm kunnen worden gebracht. De capaciteit van het vacuümsysteem is dan zeker voldoende om de leklucht weg te kunnen zuigen. De snelheid van het vacuümsysteem kan berekend worden met behulp van de volgende regel ,blz 5.33 [23].

$$S_o = \frac{V_t}{t} * \ln \frac{(P_1 - P_0)}{(P_2 - P_0)}$$

P₀ = zuigdruk van de pomp bij gesloten inlaat (N/m²)

P₁ = begindruk in de kolom (N/m²)

P₂ = gespecificeerde einddruk in de kolom (N/m²)

t = tijd om het vacuüm te bereiken (s)

V_t = volume van het systeem dat vacuüm gezogen wordt (m³)

S_o = snelheid van het pompsysteem met leidingen (m³/s)

De snelheid van de ejectoren kan bepaald worden met de volgende formule:

$$\frac{1}{S_p} = \frac{1}{S_o} - \frac{1}{C}$$

C = snelheid van het leidingsysteem (m³/s)

S_p = snelheid van de ejectoren (m³/s)

Appendix W

BEREKENINGSMETHODE FALLING FILM VERDAMPER.

De berekening van de falling film verdamper is gebaseerd op het collegediktaat I20 [11]. Het gaat om een eenvoudige berekening om een indicatie te geven van het V.O. en van de te condenseren massa stoom. De massa gecondenseerde stoom is te berekenen met:

$$M_{st} = \frac{Q}{C_p * T + r}$$

Q = warmtestroom (W)

C_p = warmtecapaciteit stoom (KJ/Kg K)

T₁ = afkoeling oververhitte stoom tot condens. temp. (C)

r = condensatiewarmte stoom (KJ/Kg)

Het oppervlak is nu te berekenen met:

$$M_{st} * T * C_p$$

$$V.O.1 = \frac{\quad}{K_u * T_{ln}}$$

$$K_u * T_{ln}$$

V.O.1 = oppervlak om stoom af te koelen (m²)

M_{st} = massastroom gecondenseerde stoom (Kg)

K_u = overall warmteoverdrachts coefficient (W/m² K)

T_{ln} = logaritmisches temperatuur verschil (C)

$$M_{st} * r$$

$$V.O.2 = \frac{\quad}{K_u * T_2}$$

$$K_u * T_2$$

reboiler		1.2	2.1	2.2	3.1	3.2
reboiler duty	W	$602 \cdot 10^3$	$1089 \cdot 10^3$	$216 \cdot 10^3$	$170 \cdot 10^3$	$24 \cdot 10^3$
stoomdruk	bar	19	19	19	19	19
stoomtemperatuur	°C	330	330	330	330	330
stoom condensatie temp	°C	210	210	210	210	210
bodem temperatuur kolom	°C	174	175	173	176	189
logaritmisch temp verschil	°C	81.8	81.8	83.0	79.4	63
condensatie temp verschil	°C	36	35	37	34	21
overall warmteoverdracht coefficient	W/m ² K	1700	1700	1700	1700	1700
V.O.	m ²	10.3	19.5	3.7	3.0	0.5
massastroom stoom	Kg/s	0.27	0.50	0.098	0.078	0.011

tabel w.1. Falling film verdamper, gepakte kolommen

V.0.2 = oppervlak om stoom te kondenseren (m²)

T₂ = condens. temp. stoom - verdamp. temp. medium (C)

r = condensatiewarmte stoom (KJ/Kg)

Het totale oppervlak van de reboiler is $V.0.tot = V.0.1 + V.0.2$
Hierna wordt het totale oppervlak nog 15 % vergroot. Voor de
resultaten zie tabel w.1 .

Appendix X

PROGRAMMA SHORTCUT DESTILLATIE.

Het shortcut programma van Process [29] is gebaseerd op Underwood-Fenske. De damp- vloeistof evenwichtskonstanten K zijn berekend met de Unifac methode. De enthalpie H en entropie S zijn berekend met Curl-Pitzer. De damp fugaciteiten worden berekend met de SRK-methode (Soave-Redlich-Kwong). Al deze rekenmodellen en ook alle stofgegevens van :water, MEG, DEG, en TEG zijn aanwezig in de bibliotheek van Process.[29]

Opgegeven worden:

voedingsstroom en samenstelling
destillaatstroom en samenstelling
bodemsamenstelling
druk
Q- waarde voeding
reflux/minimum reflux verhouding

uitgerekend worden dan:

aantal theoretische schotels
voedingsschotel
minimum reflux
reflux
condensor en reboiler duty
K-waarden
temperaturen van alle stromen

Een voorbeeld van een shortcut programma is het volgende:

```
process input listing
title problem=MEGdest
dimension si
calc notrial=20
component data
libid 1,water/2,EG/3,DEG/4,TEG
group 3844,2.5827,2.520
thermodata
type ktyp=lact
kset setno=1,srkvfug
unifac
stream data
prop strm=1,press=25,lfract=1.0*
comp=1,0.03662/2,319.597/3,36.441/4,10.169
name 1,liq feed/2,dest/3,bottom
unit operation data
shortcut name=undfen,uid=d1,kprint
feed=1
prod strm=2,rate=261.987
prod strm=3
spec strm=2,comp=3,fraction=0.001
spec strm=3,comp=2,fraction=0.55
condensor type=3
calculation keyl=2,keyh=3,rrmin=1.25,model=1
end
```

Appendix Y

PROGRAMMA_RIGOUREUZE_DESTILLATIE

In Process [29] is een destillatie berekening aanwezig dat gebaseerd is op Lewis-Mattheson. In dit rigoureuze programma kan een drukval geïntroduceerd worden. De konstanten als K , H , S , en zijn op de zelfde berekeningsmethoden gebaseerd als bij het shortcut programma. Als invoerwaarden worden de uitkomsten van het shortcut programma gebruikt. Alle damp en vloeistofstromen in de kolom worden dan gegeven per schotel met hun samenstellingen, temperaturen en drukken.

Een voorbeeld van dit rigoureuze programma is het volgende:

process input listing

```
title problem=EGdest
dimension si
calc notrial=20
component data
libid 1,water/2,EG/3,DEG/4,TEG
group 3844,2.5927,2.520
thermodata
type ktyp=lact
kset setno=1,srkvfug
unifac
stream data
prop strm=1,press=28,lfract=1.0,*
comp 1,0.03662/2,319.597/3,36.441/4,10.169
name 1,liq feed/2,dest/3,bottom
unit operation data
column name=rigdes,uid=d1,kprint
parameter tray=11,sure=50,stop=9
feed=1,10
prod ovhd=2,261.987,btms=3
condensor type=3
heat 1,1,-20.08/2,11,20.16
pspec top=30.0,dp=10
print iter=2,trail,tray=15,keyl=2,keyh=3
esti model=1,rratio=0.281,ttemp=435,btemp=437
end
```

Appendix Z

REKENMODEL

Berekening van de destillaat stroom en mol fractie in het bodemprodukt.

De overall massa balans

$$F=B+D$$

$$F x_f = B x_b + D x_d$$

$$F x_f = (F-D) x_b + D x_d$$

$$D = (x_f - x_b) / (x_d - x_b) * F$$

De molfracties zijn betrokken op de lichte sleutelcomponent. De molfracties in het bodemprodukt volgt verder uit de massabalans.

$$x_b = (F x_f - D x_d) / (F - D)$$

Voor de berekening van de bodemdruk bij een geven bodemtemperatuur is het nodig dat de bodemsamenstelling en de dampspanningen bij de bodemtemperatuur bekend zijn. De samenstelling van het bodemproduct (in molfracties) is al berekend. De dampspanning wordt berekend met een interpolatie formule afgeleid met behulp van data uit tabel 3-8 [23].

Dampspannings formules

$$\text{MEG } p_1 = 453 * 10^{\exp((T-447)/58.5)} \text{ (mbar)}$$

$$\text{DEG } p_2 = 79 * 10^{\exp((T-447)/55.7)} \text{ (mbar)}$$

$$\text{TEG } p_3 = 27 * 10^{\exp((T-447)/48.3)} \text{ (mbar)}$$

$$\text{HEG } p_4 = 4 * 10^{\exp((T-447)/46.3)} \text{ (mbar)}$$

De totale druk bij temperatuur T en samenstelling x wordt als volgt

$$p_{\text{tot}} = x_k * p_k \text{ (mbar)}$$

Als de bodemdruk bekend is kan met de geschatte drukval per theoretische schotel (opgegeven bij de invoer gegevens) en het aantal theoretische schotels in de bodemsectie en in de topsectie de druk ter plaatsen van de voedingschotel en de topdruk berekend worden. (Voor berekening van het aantal theoretische schotels

zie de FUG methode.) Met de voedings- en destillaatsamenstellingen in molfracties (opgegeven bij de invoergegevens) kan nu de temperatuur berekend worden. Hierbij wordt gebruik gemaakt van de nulpuntsbepaler bekend onder de naam Newton Raphson.

De evenwichtsconstante bij de geschatte condities op de voedingsschotel kunnen nu bepaald worden. Dit gebeurt als volgt.

$$K_k = p_k / p_{tot}$$

De relatieve vluchtigheid wordt steeds berekend ten opzichte van de zware sleutelcomponent .

$$\alpha_k = p_k / p_s$$

Bij de door ons doorgerekende kolom configuraties is de temperatuur van de aanvoerstroom altijd hoger als de gewenste voedingstemperatuur. Dit is de reden waarom de aanvoerstroom steeds adiabatisch geflasht wordt. Alle warmte die vrij komt bij het afkoelen van de aanvoerstroom wordt gebruikt om een deel van de vloeistof te verdampen. Daar de verdampingswarmte van MEG, DEG, TEG en HEG niet gelijk zijn moet bekend zijn in welke verhouding de componenten verdampen. Dit kan berekend worden met de evenwichtsconstanten . Aangenomen wordt dat dit de evenwichtsconstanten bij voedings condities zijn.

Bij de berekening zijn de volgende formules gebruikt.

Verdampingswarmte [4] blz 113.

$$\text{MEG } r_1 = 99234.2 - 95.23 * T \quad (\text{J/mol})$$

$$\text{DEG } r_2 = 129236.2 - 122.1 * T \quad (\text{J/mol})$$

$$\text{TEG } r_3 = 126156.8 - 109.9 * T \quad (\text{J/mol})$$

$$\text{HEG } r_4 = 129548 - 116 * T \quad (\text{J/mol})$$

Cp waarden [10]

$$\text{MEG } Cp_1 = 421.729 - 82437.706 / T \quad (\text{J/mol } T)$$

$$\text{DEG } Cp_2 = 536.541 - 90851.518 / T \quad (\text{J/mol } T)$$

$$\text{TEG } Cp_3 = 651.15 - 99239.334 / T \quad (\text{J/mol } T)$$

$$\text{HEG } Cp_4 = 766.353 - 107721.12 / T \quad (\text{J/mol } T)$$

Daar de verdamping en de afkoeling plaatsvinden over een temperatuurs traject moeten de formules over de temperatuur geïntegreerd worden. Bij de berekening worden de volgende aannamen gedaan.

De hoeveelheid HEG die verdampt wordt verwaarloosd.

Er wordt aangenomen dat het mengsel in evenwicht is bij voedings condities.

De FUG methode bestaat uit een drietal formules ontwikkeld door Fenske, Underwood en Gilliland [23] hoofdstuk 13.

Underwood vergelijking.

$$\sum_{k=1}^4 \frac{x_{fk} \cdot \alpha_k}{\alpha_k - \theta} = 1 - q$$

Deze vergelijking wordt opgelost met de Newton-Raphson nulpuntsbepaler. De invloed van de 4de component wordt bij de MEG DEG scheiding verwaarloosd. Met de uit de formule kan de minimale reflux worden berekend. (De waarde van θ moet steeds tussen de alfa's van de sleutelcomponenten in liggen.)

$$R_{min} = \sum_{k=1}^4 (x_{dk} \cdot \alpha_k / (\alpha_k - \theta)) + 1$$

Als ontwerpregel hebben we de reflux 1.25 maal de min. reflux genomen. Deze verhouding hangt af van de verhouding van de energiekosten en de investeringskosten. Met de Fenske vergelijking kan het minimum aantal theoretische schotels berekend worden.

Fenske vergelijking.

$$N_{thmin} = \frac{\ln((x_{d1}/x_{d2}) / (x_{b1}/x_{b2}))}{\ln \alpha_1}$$

De vergelijking van Gilliland legt het verband tussen het werkelijk aantal theoretische schotels en het minimum aantal theoretische schotels bij gekozen R-Rmin verhouding.

Gilliland vergelijking.

$$\frac{N_{th} - N_{thmin}}{N_{th} - 1} = 1 - e^{-(1 + 54.4 \cdot \psi) / (11 + 117.2 \cdot \psi)} \cdot (\psi - 1) / \psi^{0.5}$$

$$\psi = \frac{(R - R_{min})}{R + 1}$$

Lewis Matheson [40] Bij de methode van Lewis-Matheson worden de volgende veronderstellingen gemaakt.

De relatieve vluchtigheid in de top-en bodemsectie zijn constant.

De damp-en vloeistof stromen worden in de top-en bodemsectie constant verondersteld.

Een tekortkoming van het model is dat het maar kan rekenen met 1 voeding. Verder kunnen de produktstromen alleen in de top en de bodem worden afgetapt. Het model van Lewis-Matheson heeft de volgende invoer gegevens nodig.

- 1 De voedingssamenstelling.
- 2 De geschatte top samenstelling.
- 3 De relatieve vluchtigheden (t.o.v. de zware sleutelcomponent).
- 4 De reflux.
- 5 Het aantal theoretische schotels.
- 6 De plaats van de voedingsschotel.

De berekeningsmethode wordt van schotel tot schotel uitgevoerd. De geschatte topsamenstelling dient als startwaarde voor de dampsamenstelling op de topschotel. Met deze samenstelling wordt een eerste vloeistof samenstelling op de topschotel berekend .

$$l_k = v_k / \alpha_k$$

Daar moet gelden.

$$\sum_{k=1}^4 l_k = L$$

Moet de vloeistof samenstelling gecorrigeerd worden.

$$l_k = l_k * L / \sum_{k=1}^4 l_k$$

Nu is de vloeistof samenstelling op de schotel bekend. De dampsamenstelling kan berekend worden via de massabalans .

$$g_k = d_k + l_k$$

Met deze dampsamenstelling wordt nu de eerste vloeistofsamenstelling van de volgende schotel berekend. Dit proces wordt herhaald totdat de voedingsschotel is bereikt. Bij de bodemsectie wordt van onder naar boven gerekend. Met de overall massabalans per component wordt een bodem samenstelling berekend.

$$b_k = g_k - d_k$$

Deze samenstelling dient weer als startwaarde maar nu voor de vloeistofsamenstelling.

De eerst dampsamenstelling wordt nu berekend met.

$$g_k = l_k * \alpha_k$$

De samenstelling wordt weer gecorrigeerd.

$$g_k = g_k * G / \sum_{k=1}^4 g_k$$

Met de massabalans vinden we dan de vloeistofsamenstelling.

$$l_k = g_k + b_k$$

Met deze vloeistof samenstelling wordt weer de eerste damp-samenstelling op de volgende schotel berekend. Het proces wordt weer herhaald totdat de voedingsschotel is bereikt.

Op de voedingsschotel moeten de in de top- en bodemsectie berekende stromen aan elkaar passen. Als dit niet zo is moet de berekening opnieuw worden uitgevoerd. Voor deze berekening wordt een nieuwe topsamenstelling berekend.

$$dk_{\text{nieuw}} = \frac{fk}{(lkt'/lkb) * (fk/dk - 1) + 1}$$

met $lkt' = lkt * Lt / Lb$

Dit rekenproces wordt net zolang herhaald totdat de top- en bodemsectie (binnen een bepaalde nauwkeurigheid) aan elkaar passen. Nu zijn op alle schotels de damp- en vloeistofsamenstellingen bekend. Door deze samenstellingen om te rekenen in molfracties kan, bij een gegeven topdruk, op de bovenste schotel de temperatuur berekend worden. Ook kunnen bij bekende molfracties en molgewichten van de componenten de molgewichten van de damp- en vloeistof mengsels berekend worden. Met de ideale gaswet kan nu de dampdichtheid berekend worden.

$$\rho_g = \frac{p_{\text{tot}} * M_g}{R * T * 1000} \quad (\text{kg/m}^3)$$

De temperatuursafhankelijke vloeistof dichtheden per component zijn.

MEG	$\rho_{11} = 1113 / ((1 + 0.00062) * (T - 298.15))$	(kg/m ³)
DEG	$\rho_{12} = 1116 / ((1 + 0.00064) * (T - 298.15))$	(kg/m ³)
TEG	$\rho_{13} = 1123 / ((1 + 0.00069) * (T - 298.15))$	(kg/m ³)
HEG	$\rho_{14} = 1129 / ((1 + 0.00074) * (T - 298.15))$	(kg/m ³)

De vloeistofdichtheid van het mengsel kan nu berekend worden. Bij het berekenen van de oppervlaktenspanning wordt gebruik gemaakt van de volgende formule [23]

$$\sigma = \frac{(P_k * \rho_l / M_k / 1000)^{**4}}{1000} \quad (\text{N/m})$$

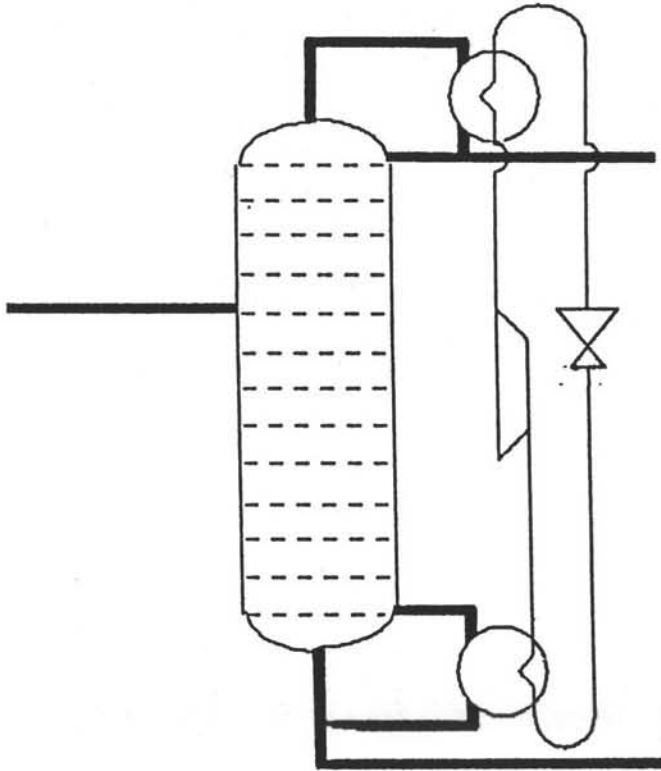
P1=139.6
P2=239.6
P3=339.6
P4=439.6

Met de gegevens kan nu de drukval (en bij schotels ook het rendement) over een theoretische schotel berekend worden (zie hoofdstuk 26). Door nu deze drukval bij de druk op te tellen is de druk op de volgende schotel bekend. Zo wordt doorgerekend tot de bodem. Als de bodem druk en temperatuur niet overeenkomen met de geschatte bodemdruk en temperatuur moet de berekening opnieuw uitgevoerd worden.

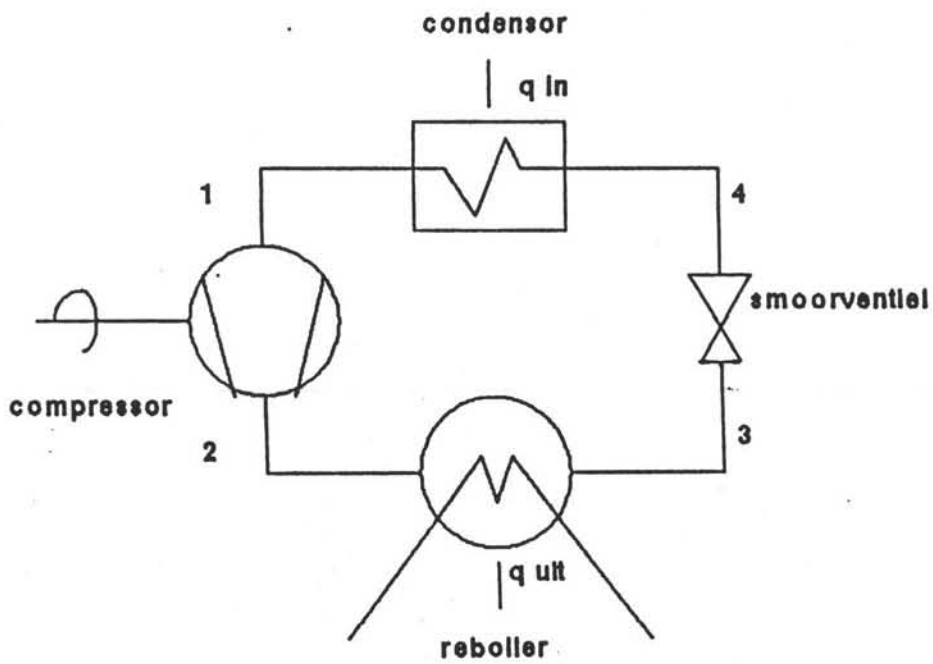
Symbolen lijst

G	=dampstroom in de kolom (mol/s)
L	=vloeistofstroom in de kolom (mol/s)
D	=destillaatstroom (mol/s)
F	=voedingsstroom (mol/s)
B	=bodemprodukt (mol/s)
K	=evenwichtsconstante
R	=reflux
R _{min}	=minimum reflux
N _{th}	=aantal theoretische schotels
N _{thmin}	=minimumaantal theoretische schotels
p	=dampspanning (N/m ²)
p _{tot.}	=totaal druk (N/m ²)
l	=aantal mol (per component) in de vloeistof (mol)
g	=aantal mol (per component) in de damp (mol)
d	=aantal mol (per component) in het destillaat (mol)
f	=aantal mol (per component) in de voeding (mol)
b	=aantal mol (per component) in het bodemprodukt
x	=molfractie in de vloeistof
y	=molfractie in de damp
k	=component nummer (1=MEG 2=DEG 3=TEG 4=HEG)
t	=grootheden op de topsectie betrokken
b	=grootheden op de bodemsectie betrokken

energie terugwinning met behulp van een warmtepomp



figuur AA1.warmte pomp



figuur AA.2.

Appendix AA

WARMTEPOMP

[11]. De warmtepomp wordt uitgevoerd als tweekraps compressor met tussenkoeling. Dit met het oog op om het rendement te verbeteren. Er wordt een adiabatiese compressie verondersteld.

De temperatuursverhoging over 1 trap wordt berekend met:

$$(p_{i+1}/p_i) = (T_{i+1}/T_i)^{n/(n-1)}$$

Hierin wordt n gelijk aan kappa verondersteld (n=1.4)

De verhouding van de druk over 1 trap wordt berekend met:

$$\text{drukverhouding} = (p_{i+1}/p_i)^{1/z}$$

Hierin is z het aantal trappen van de compressor.

De specifieke arbeid per trap wordt als volgt berekend.

$$w = n/(n-1) * p_0 * v * ((p_0/p_z)^{n-1} / n/z - 1) \text{ (J)}$$

Hierin wordt v berekend met:

$$v = R/M * ((T_i/p_i - T_{i+1}/p_{i+1})) \text{ (m}^3\text{)}$$

v = volume verandering (m³)

M = molmassa H₂O

R = gasconstante

T = temperatuur (K')

p = druk (Pa)

i geeft de trap aan

0 = begin

1 = na eerste trap

2 = na tweede trap

Bij het tussenkoelen wordt de temperatuur teruggebracht tot net iets boven de condensatietemperatuur. Het benodigde vermogen wordt berekend door de specifieke arbeid te vermenigvuldigen met de massastroom.

De massa van het water (stoom) wat bij ons als energiedragend medium wordt gebruikt wordt als volgt berekend.

$$m_1 = Q_a / r_{H_2O}$$

$$m_2 = C_p T / r_{H_2O}$$

$$m = m_1 + m_2$$

Q_a = af te voeren warmte (J)

m₁ = massastroom H₂O nodig voor het afvoeren van Q_a (kg/s)

m₂ = massastroom H₂O nodig voor het afkoelen over de smoorklep (kg/s)

m =totale massastroom H2O door het warmtepomp circuit
(kg/s)
Cp =soortelijke warmte H2O (J/'Kkg)
rH2O=verdampingswarmte H2O (J/kg)
T =temperatuursverschil over de smoorklep('K)

Appendix AB

COMPUTERPROGRAMMA DESTILLATIE.

```

Rem input
Dim A(40),C(30),Fr(8),D(30)
Dim B(14,30),E(15,4)
Input "temperatuur invoer flasher ('K)";Ta
Input "temperatuur bodem ('K)";Tb
For M=1 To 1
  For Y=1 To 1
    Input "drukval over een TU in de top sectie (mBar) ";E(Y,M)
    If E(Y,M)>2 Then
      Input "geschat schotel rendement in de top top sectie";E(Y+8,M)
    Endif
    Input "drukval over een TU in de bodem sectie (mBar)";E(Y+2,M)
    If E(Y+2,M)>2 Then
      Input "geschat schotel rendement in de bodem sectie";E(Y+10,M)
    Endif
    Input "drukval over de condensor (mBar)";E(Y+12,M)
    Input "drukval over de reboiler (mBar)";E(Y+6,M)
    Input "bodem fractie van de lichte sleutel component";E(Y+4,M)
  Next Y
Next M
For K=1 To 4
  Input "voedings fractie";A(K+4)
Next K
Input " voedingsstroom (mol/s)";B
For K=1 To 4
  Input "top fractie";A(K+28)
Next K
For M=1 To 1
  For Y=1 To 1
    Lprint Using "SCHEIDINGS SECTIE & & ",M,Y
    Lprint Using "Bodemfractie lichte sleutelcomponent = &&.&&&&",E(Y+4,M)
    Lprint
    Rem ontwerp
    Gosub Tfracctie
    Gosub Schatting
    Gosub Invoer
    Gosub Flash
    Gosub Fug
    Gosub Mcdis
    B=0
    For K=(M+Y-1) To 4
      B=B+A(K+4)
    Next K
    For K=(M+Y-1) To 4
      A(K+4)=A(K+4)/B
    Next K
    Ta=Tr
    Lprint
  
```

```

Next Y
Next M
End
Procedure Alfa
  Rem schatting alfa
  A(9)=6
  A(10)=1
  A(11)=0.3
  A(12)=0.04
Return
Procedure Schotel
  Rem schotel afmetingen
  Hw=0.03
  S=0.025
  Bd=0.6
  Dg=0.01
  Cd=0.44
  Cw=0.9
  Hst=0.5
  Hsb=0.4
Return
Procedure CpdT
  D(1)=421.7294
  D(2)=536.541
  D(3)=651.15
  D(4)=766.353
  D(5)=82437.706
  D(6)=90851.518
  D(7)=99239.334
  D(8)=107721.12
  Rem warmte die vrij komt bij afkoelen van eg deg teg teeg
  Dt=Tu-Ti
  For K=M To 4
    C(K)=D(K)*Dt-D(K+4)*Log10(Tu/Ti)
  Next K
Return
Procedure Verdamp
  D(1)=99234.2
  D(2)=129236.2
  D(3)=126156.8
  D(4)=129548
  D(5)=95.23
  D(6)=122.1
  D(7)=109.96
  D(8)=116
  Rem warmte nodig voor verdampen van eg deg teg teeg
  For K=M To 4
    C(K+4)=D(K)-D(K+4)*T

```

```

      C(K+12)=D(K)-D(K+4)/2*(Tu+Ti)
    Next K
  Return
Procedure Dampdruk
  D(1)=453
  D(2)=79
  D(3)=27
  D(4)=4
  D(5)=58.5
  D(6)=55.7
  D(7)=48.3
  D(8)=46.3
  For K=M To 4
    C(K+8)=D(K)*10^((T-447)/D(K+4))
  Next K
  Return
Procedure Roh
  D(1)=0.00062
  D(2)=0.00064
  D(3)=0.00069
  D(4)=0.00074
  Rem dichtheid
  D(5)=1113
  D(6)=1116
  D(7)=1123
  D(8)=1129
  Rem molnassa
  D(9)=62.07
  D(10)=106.12
  D(11)=150.18
  D(12)=194.21
  Rem p voor opp.spanning
  D(13)=139.6
  D(14)=239.6
  D(15)=339.6
  D(16)=439.6
  Rem dichtheid
  Mov=0
  For K=M To 4
    C(K+16)=Fr(K)*D(K+8)
    Mov=Mov+C(K+16)
  Next K
  Rov=P/B.314/T/10*Mov
  Rol=0
  Mol=0
  For K=M To 4
    C(K+16)=Fr(K+4)*D(K+8)
    Mol=Mol+C(K+16)

```



```

Next K
For K=M To 4
  D(K)=(1+D(K)*T-298.15)/D(K+4)
  Rol=Rol+D(K)*C(K+16)/Mol
Next K
Rol=1/Rol
Os=0
For K=M To 4
  Os=Os+D(K+12)*(1/D(K)/1000/D(K+8)*Fr(K+4))
Next K
Os=(Os^4)/1000
Return
Procedure Tbfraction
For K=M To 4
  A(K)=A(K-M+29)
Next K
D=(A(M+4)-E(Y+4,M))/(A(M)-E(Y+4,M))*B
Print Using "d=###.### mol/s",D
For K=M To 4
  A(K+20)=(A(K+4)*B-A(K)*D)/(B-D)
  Print A(K+20)
Next K
Return
Procedure Schatting
Pb=0
Rem schatting van druk
T=Tb
Gosub Dampdruk
For K=M To 4
  Pb=Pb+A(K+20)*C(K+8)
Next K
Gosub Alfa
Nf=(Log((A(M+4)/A(M+5))/(A(M+20)/A(M+21)))/Log(A(M+8)/A(M+9)))*2.6)
Nt=(Log((A(M)/A(M+1))/(A(M+4)/A(M+5)))/Log(A(M+8)/A(M+9)))*2.6)
Pf=Pb-(Nf-1)*E(Y+2,M)-E(Y+6,M)
Pt=Pf-(Nt)*E(Y,M)
Rem schattig van de temp
P=Pt
T=400
For K=M To 4
  Fr(K+4)=A(K)
Next K
Gosub Temp
Tt=T
P=Pf
T=400
For K=M To 4
  Fr(K+4)=A(K+4)

```

```

Next K
Gosub Temp
Tf=T
Lprint "SCHATTING"
Lprint
Lprint "          top    voeding    bodem"
Lprint Using "p(mbar)   $$$   $$$   $$$ ",Pt,Pf,Pb
Lprint Using "T('K)    $$$   $$$   $$$ ",Tt,Tf,Tb
Lprint
Return
Procedure Temp
O=0
LX=0
Rem newton raphson
While LX=0
V=0
Gosub Dampdruk
For K=M To 4
V=V+C(K+8)*Fr(K+4)
Next K
W=(C(9)/D(5)*Fr(5)+C(10)/D(6)*Fr(6)+C(11)/D(7)*Fr(7)+C(12)/D(8)*Fr(8))*Log(10)
T1=T-(V-P)/W
If Abs(T1-T)<=10^-3 Then
LX=1
Endif
O=O+1
If O>100
Print T1
Stop
O=0
Endif
T=T1
Wend
Return
Procedure Drukval
If I=M Then
Tt=T
Endif
If I>6 Then
Dv=E(Y,M)
Sr=E(Y+8,M)
Else
Dv=E(Y+2,M)
Sr=E(Y+10,M)
Endif
Ver=Ls*Mol/Vs/Mov
Vs=Vs*Mov/1000
If Dv>2 Then

```

```

If I=N Or I=6 Then
  Gosub Schotel
  F=0.392699*Dg^2/((3^0.5)/4*S^2)
  If I=N Then
    Hs=Hst
  Else
    Hs=Hsb
  Endif
  Lme=F^0.5*(4/3*15*9.81*Os/Cd/Rol)^0.25
  Lmb=0.15*Hs^0.5
  If Lmb<=0.13 Then
    If Lmb>Lme Then
      Print "meesleuring is limiterend"
      Hs=(Fix(42*Lme^2*10)+1)/10
      Lmb=0.15*Hs^0.5
    Endif
  Else
    Lmb=0.23*Hs-0.06
  Endif
  Con=0.8*Lmb*(Rol*Rov)^0.5
  Ak=Vs/Con
  Dk=1.12837*Ak^0.5
  Av=(1-Bd^2)^0.5
  Av=(Atn(Av/Bd)+Av*Bd)/3.1415927*2
  Ac=Av*Ak
  Con=Con/Av
  Ba=Bd*Dk/Ac
  Lprint "SCHOTEL KOLOM"
  Lprint Using "invoer:Hw=£.£££ m s=£.£££ m dg=£.££££ m Hs=£.££ m",Hw,S,Dg,Hs
  Lprint Using "      Cw=£.£££ Cd=£.£££ Eo=£.£££",Cw,Cd,Sr
  Lprint Using "uitvoer:con=££.£££ kg/m2s Ac=££.££ m2 ",Con,Ac
  Lprint Using "      D=££.££ m b=£.£££ m/m2",Dk,Ba
Endif
Kolom:
Ug=Con/Rov
H1=0.6*Hw^0.5*(Ver/Ba*(Rov/Rol)^0.5)^0.25*S^0.25
Fg=Ug*Rov^0.5/F
Gd1=(2*Os/Dg)^0.5
Gd2=(0.37*Dg*9.81*(Rol-Rov)^(5/4)/Rov^0.25)^0.5
If (Fg<Gd2) Or (Fg<Gd1) Then
  Lprint "doorleken"
  Lprint Using "De voedings schotel is schotel ££",G
  Lprint Using " fg=£££.££ (kg/m2s)0.5 fgain =£££.££ (kg/m2s)0.5 ",Fg,Gd
  S=S+0.001
  F=0.392699*Dg^2/((3^0.5)/4*S^2)
  Goto Kolom
Endif
Dp=(0.5*Rov*(Ug/F/Cw)^2+H1*9.81*Rol)/100/Sr

```

```

Else
  If Dv>0.4 Then
    If I=N Or I=G Then
      Lprint "GEPAKTE KOLOM (MELLA-pakking)"
      Con=2.3*rov^0.5
      Ak=Vs/Con
      Dk=1.12837*Ak^0.5
      Lprint Using "con=##.## kg/m2s D=##.## m",Con,Dk
    Endif
    F=Con/rov^0.5
    Ug=Con/rov
    If (Ver<1.2) And (Ver>0.8) Then
      If Pt<50 Then
        Dp=F^2/4.5/2.7
      Else
        Dp=F^2/4/2.7
      Endif
    Else
      Ls=Ls*Mol/Ak/Rol/1000
      Dp=((Ls*3600-5.8)*0.085+1.6)/2.7
    Endif
  Else
    If I=N Or I=G Then
      Lprint "GEPAKTE KOLOM (BX-pakking)"
      Con=2.3*rov^0.5
      Ak=Vs/Con
      Dk=1.12837*Ak^0.5
      Lprint Using "con = ##.## kg/m2s D=##.## m",Con,Dk
    Endif
    Ug=Con/rov
    F=Con/rov^0.5
    Dp=0.7*10^((F-3)/2)
  Endif
Endif
Return
Procedure Invoer
  T=Tf
  Gosub Dampdruk
  For K=M To 4
    A(K+16)=C(K+8)/Pf
  Next K
  Z=A(M+17)
  T=Tt
  Gosub Dampdruk
  For K=M To 4
    A(K+8)=C(K+8)/C(M+9)
  Next K
  T=Tb

```

```

Gosub Dampdruk
For K=M To 4
  A(K+12)=C(K+8)/C(M+9)
Next K
For K=M To 4
  A(K)=A(K)*D
  A(K+4)=A(K+4)*B
  A(K+20)=A(K+20)
Next K
Lprint "INVOER"
Lprint
Lprint "  voeding K-waarde distillaat "
For K=M To 4
  Lprint Using "E .EEE .EEE  EE .EEE  EEE .EEE  ",K,A(K+4),A(K+16),A(K)
Next K
Lprint "  alfa top  alfa bodem "
For K=M To 4
  Lprint Using "E E .EEE  E .EEE  ",A(K+8),A(K+16)
Next K
Lprint
Return
Procedure Flash
L=0
V=0
Ti=Ta
Tu=Tf
Rem flash berekening
Gosub Cpdt
A=0
For K=M To 4
  A=A+C(K)*A(K+4)
Next K
Gosub Verdamp
Schattings:
C=A(M+16)*A(M+17)*(A(M+4)*C(M+12)+A(M+5)*C(M+13)+A)
E=A(M+16)*(A(M+4)*C(M+12)+A)+A(M+17)*(A(M+5)*C(M+13)+A)
C=C/A
E=E/A
H=(-E-(E^2-4*C)^0.5)/2
H1=(-E+(E^2-4*C)^0.5)/2
If H<0 Then
  H=H1
Endif
Print H
If M<=2 Then
  Rem newton raphson
  LY=0
  O=0

```

```

G=1
C=0
E=0
For K=M To M+2
  G=G*(K+16)
  E=E+A*(K+4)*C*(K+12)
Next K
For K=M To M+2
  C=C+(G/A*(K+16))*(E-A*(K+4)*C*(K+12)+A)
Next K
G=G*(E+A)
E=0
For K=M To M+2
  E=E+A*(K+16)*(A*(K+4)*C*(K+12)+A)
Next K
G=G/A
C=C/A
E=E/A
While LZ=0
  P=H^3+E*H^2+C*H+G
  Q=3*H^2+2*E*H+C
  H1=H-P/Q
  O=O+1
  If O>500 Then
    Stop
  Endif
  If Abs(H1-H)<=10^-6
    LZ=1
  Endif
  H=H1
Wend
Endif
A=A/1000
F=H/(H+1)
V=(1-F)*B
L=F*B
Lprint "FLASHER"
Lprint
Lprint Using "Ti= ### 'K",Ti
Lprint Using "Tu= ### 'K",Tu
Lprint Using "Cpdt.molstroom =#####.## kJ/s",A
Lprint Using "V= ###.## mol/s",V
Lprint Using "L= ###.## mol/s",L
Lprint Using "q= .##",F
Lprint
Return
Procedure Fug
  For K=M To 4

```

```

A(K+12)=(A(K+8)*A(K+12))^0.5
Next K
Rem fug
Rem poly
G=A(M+12)*A(M+13)*(A(M+4)/B+A(M+5)/B-(1-F))
C=(A(M+12)*A(M+4)/B+A(M+13)*A(M+5)/B-(1-F)*(A(M+12)+A(M+13)))
A=-(1-F)
H=(C-(C^2-4*A*G)^0.5)/(2*A)
H1=(C+(C^2-4*A*G)^0.5)/(2*A)
If H<=0 Then
  H=H1
Endif
Print H
If M<=2 Then
  LZ=0
  O=0
  A=1
  C=0
  E=0
  For K=M To M+2
    A=A*A(K+12)
    E=E+A(K+4)/B
  Next K
  For K=M To M+2
    C=C-(A/A(K+12)*(E-A(K+4)/B+(F-1)))
  Next K
  A=A*(E+(F-1))
  E=0
  For K=M To M+2
    E=E+A(K+12)*(A(K+4)/B+(F-1))
  Next K
  A=A/(1-F)
  C=C/(1-F)
  E=E/(1-F)
  While LZ=0
    P=H^3+E*H^2+C*H+A
    Q=3*H^2+2*E*H+C
    H1=H-P/Q
    O=O+1
    If O>500 Then
      Stop
    Endif
    If Abs(H1-H)<=10^-4
      LZ=1
    Endif
    H=H1
  Wend
Endif

```

```

Q=0
For K=M To 4
  Q=Q+A(K+12)*A(K)/D/(A(K+12)-H)
Next K
A=Q-1
E=1.25*A
Rem Fenske
C=Log((A(M)/A(M+1))/(A(M+20)/A(M+21)))/Log(A(M+12))
G=(Log((A(M)/A(M+1))/(A(M+4)/A(M+5)))/Log(A(M+12)))
Rem Gilliland
Q=(E-A)/(E+1)
I=1-Exp((1+54.4*Q)/(11+117.2*Q)*(Q-1)/Q^0.5)
N=(I+C)/(1-I)
G=((I+G)/(1-I))
If Frac(G)>=0.5 Then
  G=Fix(G)+1
Else
  G=Fix(G)
Endif
Print Using "g=## ",G
If Frac(N)>=0.5 Then
  N=Fix(N)+1
Else
  N=Fix(N)
Endif
G=N-G
I=E/A
Lprint "FENSKE UNDERWOOD GILLILAND "
Lprint
Lprint Using "R/Rmin= ##.## ",I
Lprint Using "Rmin= ###",A
Lprint Using "R= ###",E
Lprint Using "Nmin= ##.##",C
Lprint "n= ";N
Lprint
H=0
Q=0
Return
Procedure Mcdis
LZ=0
Rem stromen
Opnieuw:
C=E*D
A=C+F*B
D=(E+1)*D
B=D-(1-F)*B
While LZ=0
  Rem absortie sectie

```



```

For K=M To 4
  B(K,N+1)=A(K)*(E+1)
Next K
For I=N To 6 Step -1
  Gosub Omlaag
Next I
Rem voedings schotel
For K=M To 4
  A(K+16)=A/C*B(K+4,G)
Next K
Rem strip sectie
For K=M To 4
  B(K+4,0)=(A(K+4)-A(K))*A/(A-B)
Next K
For I=1 To 6
  Gosub Omhoog
Next I
Rem convergentie
J=0
For K=M To 4
  J=J+(A(K+16)-B(K+4,G))^2
Next K
If J<10^-3 Then
  LZ=1
Endif
O=O+1
If O>300 Then
  Print J
  O=0
  D=D-C
  B=A-B+D
  Goto Opnieuw
Endif
If LZ=0 Then
  J=0
  For K=M To 4
    A(K)=A(K+4)/(A(K+16)/B(K+4,G)*(A(K+4)/A(K)-1)+1)
    J=J+A(K)
  Next K
Endif
Wend
Rem k-waarde over de voedingschotel
For K=M To 4
  B(K+8,G+1)=(B(K,G+2)/D)/(B(K+4,G+1)/C)
  B(K+8,G)=(B(K,G+1)/D)/(B(K+4,G)/A)
Next K
P=P+1
For I=N To 1 Step -1

```

```

Rem fraktie
Vs=0
Ls=0
For K=M To 4
  Vs=Vs+B(K,I)
  Ls=Ls+B(K+4,I)
Next K
If I=N Then
  D=Vs
  C=Ls
Endif
If I=1 Then
  B=Vs
  A=Ls
Endif
For K=M To 4
  B(K,I)=B(K,I)/Vs
  B(K+4,I)=B(K+4,I)/Ls
Next K
Rem temperatuurs verloop over de kolom
For K=M To 4
  Fr(K+4)=B(K+4,I)
  Fr(K)=B(K,I)
Next K
Gosub Temp
Gosub Roh
Gosub Drukval
Lprint Using "TU  $\Delta T$  = $\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta$ 'K dp= $\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta$  mBar p= $\Delta\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta$  mBar ",I,T,Dp,P
Lprint Using "   Ug= $\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta$  m/s f= $\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta$  hl= $\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta\Delta$  m",Ug,F,hl
Lprint Using "   Mv= $\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta$  g/mol Ml= $\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta$  g/mol os= $\Delta$ . $\Delta\Delta\Delta\Delta$  N/m",Mov,Mol,Os
Lprint Using "   Rov= $\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta\Delta$  kg/m3 Rol= $\Delta\Delta\Delta\Delta$ . $\Delta\Delta$  kg/m3",Rov,Rol
P=P+Dp
Next I
Pb=P
Rem condensor
P=Pt-E(Y+12,M)
Pc=P
For K=M To 4
  Fr(K+4)=B(K+4,N)
Next K
Gosub Temp
Tc=T
Rem reboiler
P=Pb+E(Y+6,M)
Pr=P
B1=0
For K=M To 4
  A(K+4)=(B(K+4,I)*A-B(K,I)*B)

```

```

    B1=B1+A(K+4)
Next K
For K=M To 4
    Fr(K+4)=A(K+4)/B1
Next K
Gosub Temp
Tr=T
Rem warnte in uit
Rem warnte top
U=0
T=Tc
Gosub Verdamp
For K=M To 4
    U=U-C(K+4)*B(K,N)*D/1000
Next K
Ti=Ta
Tu=Tc
Qt=0
Gosub Cpdt
For K=M To 4
    A(K)=B(K,N)*D-B(K+4,N)*C
    Qt=Qt-A(K)*C(K)/1000
Next K
Rem warnte bodem
T=Tr
R=0
For K=M To 4
    R=R+C(K+4)*B(K,1)*B/1000
Next K
Qb=0
Ti=Ta
Tu=Tr
Gosub Cpdt
For K=M To 4
    Qb=Qb-A(K+4)*C(K)/1000
Next K
Gosub Print
Return
Procedure Print
Lprint "MULTI COMPONENTEN DISTILLATIE"
Lprint "Lewis Matheson"
Lprint
For K=M To 4
    Lprint Using "dE= ###.###",K,A(K)
Next K
Lprint
Lprint Using "dH= ##### kJ/s",Qt
Lprint

```

```

Lprint Using "Cond.:T=###.## 'K dp=##.## mBar p=###.## mBar",Tc,E(Y+12,M),Pc
Lprint Using "Cond.cap=#####.## kJ/s",U
Lprint Using " V=###.## L=###.##",D,C
For I=N To 1 Step -1
  Lprint "-----"
  If I=6 Then
    Lprint " voedingsschotel"
  Endif
  Lprint "n=";I;" y x K "
  For K=M To 4
    Lprint Using "## ###.### ##.### ##.### " ,K,B(K,I),B(K+4,I),B(K+8,I)
  Next K
Next I
Lprint "-----"
Lprint Using " V=###.## L=###.##",B,A
For K=M To 4
  Lprint Using "b## ##.###",K,A(K+4)
Next K
Lprint
Lprint Using "dH= ##### kJ/s",Db
Lprint
Lprint Using "reboiler:T= ##.## dp=##.## mBar p=###.## mBar",Tr,E(Y+6,M),Pr,R
Lprint Using "verd.cap.=#####.## kJ/s",R
Lprint Using;" x K "
For K=M To 4
  Lprint Using "## ##.### ##.### " ,K,Fr(K+4),B(K+8,0)
Next K
Lprint
Return
Procedure Omlaag
J=0
For K=M To 4
  B(K+4,I)=B(K,I+1)/A(K+12)
  J=J+B(K+4,I)
Next K
For K=M To 4
  B(K+4,I)=C/J*B(K+4,I)
  B(K+8,I)=J/D*A(K+12)
  B(K,I)=B(K+4,I)+A(K)
Next K
Return
Procedure Omhoog
J=0
For K=M To 4
  B(K,I)=A(K+12)*B(K+4,I-1)
  J=J+B(K,I)
Next K
For K=M To 4

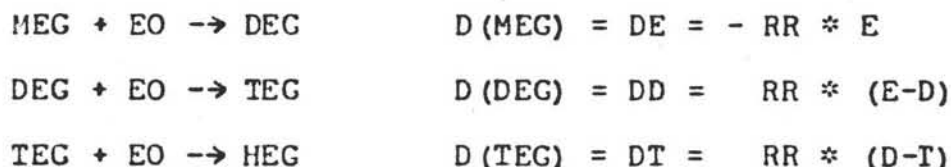
```

```
B(K,I)=B/J*B(K,I)
B(K+8,I-1)=A/J*A(K+12)
B(K+4,I)=B(K,I)+A(K+4)-A(K)
Next K
Return
```

Appendix AC

BIJLAGE 1 : COMPUTERPROGRAMMA-
REACTIEVORDERINGSPLAATJES.

De reactiesnelheid van de verschillende glycolen is (relatief) alleen afhankelijk van de respectievelijke glycolconcentraties. De optredende reacties zijn :



Het computerprogramma rekent vanaf de voedingssamenstelling plakje voor plakje de omzettingen en de daaruit volgende veranderingen in de samenstelling uit. De term RR is een soort reactiesnelheidsconstante die meestal 1/30 gekozen is. Het eenvoudige programma en een uitvoervoorbeeld zijn hieronder afgebeeld.

1000:PRINT "ZO WERKT HE T"	ZO WERKT HET
1010:INPUT "RR=";RR:	E= 0.08440 D= 0.77422
USING "##.####":	T= 0.13198 H= 0.00938
INPUT "E0=";E0	@?&?%\$#@?&?%\$#
1015:E=E0:D=1-E	E= 0.07124 D= 0.66579
1020:T=0:H=0:N=0	T= 0.22492 H= 0.03803
1025:FOR N=1 TO 5	@?&?%\$#@?&?%\$#
1030:DE=-RR*E:DD=RR*(E- D):DT=RR*(D-T)	E= 0.06013 D= 0.57235
1040:D=D+DD:T=T+DT:E=E+ DE:H=1-E-D-T	T= 0.28746 H= 0.08004
1045:NEXT N	@?&?%\$#@?&?%\$#
1050:PRINT "E=";E;" D="	E= 0.05076 D= 0.49186
;D:PRINT "T=";T;"	T= 0.32653 H= 0.13083
H=";H	@?&?%\$#@?&?%\$#
1052:PRINT "@?&?%\$#@?&?%\$ #"	E= 0.04284 D= 0.42255
1060:GOTO 1025	T= 0.34771 H= 0.18687
	@?&?%\$#@?&?%\$#
	E= 0.03616 D= 0.36290
	T= 0.35542 H= 0.24549
	@?&?%\$#@?&?%\$#

Appendix AD

BIJLAGE 2 : PROGRAMMA VOOR HET BEREKENEN VAN DE VOEDINGSSTROOM.

Op in principe dezelfde wijze als in het programma van bijlage 1 wordt het verloop van de glycolmolfracties berekend. Dit gebeurt nu nauwkeuriger met behulp van een Runge-Kutta subroutine. De molfracties worden omgerekend naar molstromen door de molstroom TEG gelijk aan de gewenste hoeveelheid te stellen. Met eenvoudige testjes wordt gekeken of de MEG en DEG omzettingen de gewenste naderen. Is dit het geval dan wordt er uitvoer gegeven. Programma plus uitvoervoorbeeld hieronder weergegeven.

800: "F3S"		900: INPUT "E0="; E
802: F1=-RR*E		910: INPUT "RR="; RR, "WENS
804: F2=RR*(E-D)	E= 0.260241	#MOL T="; TW
806: F3=RR*(D-T)	D= 0.488293	915: E0=E; D0=1-E0; E0=0
808: RETURN	T= 0.199532	920: D=1-E; T=0; H=0; I=0; KT
810: "RK3"	H= 0.051931	=0; Z=1/1
812: P=E; R=D; K=T	ME= 1.686158	930: GOSUB "RK3"
814: GOSUB "F3S"	MD= 1.053662	940: H=1-E-D-T; BEEP 2
816: Q=F1; S=F2; L=F3	MT= 10.895452	943: MT=TW/T; ME=MT*(E0-E)
818: E=P+Z*F1/2; D=R+Z*F2/	E= 0.251710	; MD=MT*(D0-D)
2; T=K+Z*F3/2; GOSUB "	D= 0.480675	944: KT=KT+1; IF K>30 THEN
F3S"	T= 0.208873	990
820: Q=Q+2*F1; S=S+2*F2; L=	H= 0.058740	945: IF ME/MD<1.5 THEN 93
L+2*F3	ME= 1.699550	0
822: E=P+Z*F1/2; D=R+Z*F2/	MD= 1.085828	946: IF ME/MD>1.8 THEN 93
2; T=K+Z*F3/2; GOSUB "	MT= 10.408188	0
F3S"		949: USING "##.#####"
824: Q=Q+2*F1; S=S+2*F2; L=		950: PRINT "E="; E
L+2*F3		951: PRINT "D="; D
826: E=P+Z*F1; D=R+Z*F2; T=		952: PRINT "T="; T
K+Z*F3; GOSUB "F3S"		953: PRINT "H="; H; I=0
827: USING "##.#####"		955: USING "#####"
828: Q=Q+F1; S=S+F2; L=L+F3		965: PRINT "ME="; ME
830: E=P+Z*Q/6; D=R+Z*S/6;	- 215 -	970: PRINT "MD="; MD
T=K+Z*L/6		975: PRINT "MT="; MT
832: RETURN		980: GOTO 930

Appendix AE

BIJLAGE 3 : GEBRUIKTE FYSISCHE GEGEVENS.

Gegevens afkomstig uit de voorstudie.[10]

Dichtheden zuivere componenten in kg/m³ :

RHO-EO (T) = 882 / (1 + 1.61E-3 * (T - 298.15))
RHO-MEG (T) = 1113 / (1 + 0.62E-3 * (T - 298.15))
RHO-DEG (T) = 1116 / (1 + 0.64E-3 * (T - 298.15))
RHO-TEG (T) = 1123 / (1 + 0.69E-3 * (T - 298.15))
RHO-HEG (T) = 1129 / (1 + 0.74E-3 * (T - 298.15))

Soortelijke warmtes in J/g*K :

Cp EO (T) = 2.8233 - 237.0493 / T
Cp MEG (T) = 6.79441 - 1328.1409 / T
Cp DEG (T) = 5.05598 - 856.1206 / T
Cp TEG (T) = 4.3358 - 660.8026 / T
Cp HEG (T) = 3.946 - 554.6631 / T

Reactiewarmtes in kJ/mol :

MEG + EO → DEG delta H = -81.8
DEG + EO → TEG delta H = -84.8
TEG + EO → HEG delta H = -86.9

Appendix AF

BIJLAGE 4 : AFLEIDING BUISEFORMULE.

MOLBALANS OVER EEN PLAKJE :

$$\text{UIT} = \text{IN} - \text{OMZ}$$

$$\Phi_{mol} |_{x+\Delta x} = \Phi_{mol} |_x - (-r_a) \cdot A \cdot dx$$

$$(\Phi_{mol} |_{x+\Delta x} - \Phi_{mol} |_x) = -(-r_a) \cdot V \cdot dz$$

$$\Phi_{mol} |_0 (\xi |_x - \xi |_{x+\Delta x}) = -k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [EO] \cdot [GLY] \cdot V \cdot dz$$

$$\frac{d-\xi}{dz} \cdot \frac{-k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [EO] \cdot [GLY] \cdot V}{\Phi_v \cdot [EO]_0} = -k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot z \cdot (1-\xi)$$

$$\frac{d(1-\xi)}{(1-\xi)} = -k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot z \cdot dz$$

$$\text{op } z=0 \quad \xi = 0 \quad \text{op } z=1 \quad \xi = \xi_{EIND}$$

$$\int_0^{\xi_{EIND}} \frac{d(1-\xi)}{(1-\xi)} = \int_0^1 -k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot z \cdot dz$$

$$\Rightarrow z = \frac{-\ln(1-\xi_{EIND})}{k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY]}$$

ANNAMES : k (dus T) en $[GLY]$ CONSTANT OVER DE BUIS.

Appendix AG

BIJLAGE 5 : PROGRAMMA WARMTEWISSELING IN DE BUIS.

De buis is in plakjes verdeeld. Met een RK-subroutine wordt het conversieprofiel berekend. De temperatuur wordt na ieder plakje opnieuw gecorrigeerd voor de warmteproductie in en de warmtestromen van en naar het vorige plakje. De warmteproductie in een plakje bedraagt : $\Delta H \cdot \phi \cdot \text{mol}$ om te zetten ΔH reactie . De warmtetoe of afvoer bedraagt het product van $U \cdot A$ (plakje) en het temperatuursverschil van het plakje en het medium om de buis. De netto warmtestroom naar het plakje bepaald de temperatuursverandering. Om deze "ruwe" methode goed te laten werken is het nodig een groot aantal plakjes te nemen, 1000 stuks. Uitvoer wordt om de 50 stapjes gegeven.

```

1210: "FX"
1212: F=2.9028E10*EXP (-
      22327/(1.987*T))* (
      1-X)
1214: RETURN
1220: "RK"
1222: P=X
1224: GOSUB "FX"
1226: Q=F
1228: X=P+H*F/2: GOSUB "F
      X"
1230: Q=Q+2*F
1232: X=P+H*F/2: GOSUB "F
      X"
1234: Q=Q+2*F
1236: X=P+H*F: GOSUB "FX"
1238: Q=Q+F
1240: X=P+H*Q/6
1242: RETURN

1300: INPUT "#STEPS=";N,
      "ZD=";A,"ZN=";B,"K
      SIO=";Y
1305: H=(B-A)/N:T=273+15
      0
1310: Z=A:X=Y:SJ=0:SK=0
1312: FOR V=1 TO 20
1315: FOR W=1 TO 50
1320: GOSUB "RK"
1325: QJ=(X-Y)*407.3:SJ=
      SJ+QJ
1326: QK=1.6099E3*(498-T
      )/N:SK=SK+QK
1327: DT=(QJ+QK)/3.9780:
      Y=X
1328: T=T+DT:BEEP 1
1329: NEXT W
1335: PRINT "K=";X:PRINT
      " T=";T:PRINT "%&
      &?00"
1337: NEXT V
1400: INPUT "X=";X

```

Appendix AH

BIJLAGE 6 : DRUK VAN HET REACTIE MENGSEL.

De druk van een EO/glycol mengsel bij een temperatuur van 225 °C (=498 K)

Het mengsel gedraagt zich ideaal dus de dampspanning van het mengsel is gelijk aan : $\sum_i x_i \cdot p_i$

P ...= dampspanning zuivere component ...

P MEG (225 °C) = 34.0 psia = 2.3 atm [4]

P DEG (225 °C) = 8.5 psia = 0.58 atm [4]

De temperatuur van 225 °C is hoger dan de kritische temperatuur van EO. De "dampspanning" van EO bij 225 °C is gevonden door het extrapoleren van de dampspanningslijn.

P EO (225 °C) = 102 atm [4]

De drukken op bovenstaande manier met bovenstaande waarden berekend voor de buis en tankreactor komen goed overeen met de waarden berekend m.b.v. PROCESS voor verschillende EO/MEG-mengsels. Zie onderstaande tabel. (1)= MEG.

PFES KPA	MOLE X (1)
10413.828	0.0
9882.270	0.0500
9518.902	0.1000
9335.102	0.1500
9199.250	0.2000
9028.520	0.2500
8788.262	0.3000
8464.977	0.3500
8055.973	0.4000
7561.785	0.4500
6986.672	0.5000
6336.879	0.5500
5620.312	0.6000
3450.009	0.6500
2988.891	0.7000
2526.846	0.7500
2064.353	0.8000
1601.951	0.8500
1140.250	0.9000

Appendix AI

BIJLAGE 7 : ADIABATISCHE BUISBEREKENING.

Molbalans over plakje van de buis levert: (BIJLAGE 4)

$$\frac{d\xi}{dz} = k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [\text{GLY}] \cdot z \cdot (1-\xi)$$

ADIABATISCH, DUS:

$$\phi_v \cdot \rho \cdot c_p \cdot \Delta T = \phi_v \cdot c_o \cdot \xi \cdot \Delta H_r$$

$$\phi_{\text{massa}} \cdot c_p \cdot dT = \phi_{\text{mol.o}} \cdot d\xi \cdot \Delta H_r$$

$$\frac{dT}{d\xi} = \frac{\phi_{\text{mol.o}} \cdot \Delta H_r}{\phi_{\text{massa}} \cdot c_p} = \Delta T_{\text{ADIA}}$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{dT}{d\xi} \cdot \frac{d\xi}{dz} = \Delta T_{\text{AD}} \cdot \frac{d\xi}{dz}$$

Dus met enkelvoudige RK verloop van zowel T als ξ .

```

1205: "BUIS": USING ".###"      1250: N=200: H=1: N: X=0: T0
      #^: GOTO 1250              =404: TA=102.6
1210: "FX"                      1255: FOR V=1 TO 20
1212: F=2.0645E10*EXP (-       1260: FOR W=1 TO 10
      22327/(1.987*(TA*X      1261: GOSUB "RK"
      +T0)))*(1-X)           1262: NEXT W
1214: RETURN                    1263: PRINT "KSI="; X
1220: "RK"                      1264: T=TA*X+T0: PRINT "T
1222: P=X                       EMP="; T
1224: GOSUB "FX"               1265: NEXT V
1226: Q=F                       1268: V=0: W=0: GOTO 1255
1228: X=P+H*F/2: GOSUB "F
      X"
1230: Q=Q+2*F
1232: X=P+H*F/2: GOSUB "F
      X"
1234: Q=Q+2*F
1236: X=P+H*F: GOSUB "FX"
1238: Q=Q+F
1240: X=P+H*Q/6
1242: RETURN

```

Appendix AJ

BIJLAGE 8 : BEREKENING EN AFLEIDING
TANK/BUIS-COMBINATIE.

Molbalans Tank $\Phi_{mol} = \Phi_{mol,0} - (-r_a) \cdot V$
 $\Phi_{mol} - \Phi_{mol,0} = -k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [S_LV] \cdot [EO] \cdot V$
 met $\xi = (\Phi_0 - \Phi) / \Phi_0$ en $[EO] = \Phi_{mol} / \Phi_v$ VOLGT

$$V = \frac{\xi}{(1-\xi)} \cdot \frac{\Phi_v}{k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [S_LV]}$$

BOVENSTAANDE FORMULE IS GEBRUIKT IN ONDERSTAAND PROGRAMMA
 MET BEREKENT VOLUME VAN TANK EN BUIS VOOR EEN OVERALL ξ VAN 95

1500: USING "##.###^"	KSI-T= 9.9000E-01
1510: INPUT "KSI TANK= "	V-TA= 4.8655E 02
;X	KSI-B 0.0000E 00
1520: PRINT "KSI-T="; X	VB= 0.0000E 00
1530: VT=X/(1-X)*4.9147	TOT= 4.8655E 02
1540: PRINT "V-TA="; VT	-----
1550: CT=4.8487*(1-X)	KSI-T= 9.8000E-01
1560: KB=(CT-.048487)/CT	V-TA= 2.4082E 02
1570: TB=-LN (1-KB)/2.60	KSI-B 5.0000E-01
44E-4	VB= 3.4066E 00
1580: VB=TB*1.28E-3	TOT= 2.4422E 02
1590: PRINT "KSI-B"; KB	-----
1600: PRINT "VB="; VB	KSI-T= 9.7000E-01
1605: V=VT+VB: PRINT "TOT	V-TA= 1.5890E 02
="; V	KSI-B 6.6666E-01
1607: PRINT "-----	VB= 5.3994E 00
----"	TOT= 1.6430E 02
1610: GOTO 1500	-----

Appendix AK

BIJLAGE 9 : BEREKENING ADIABATISCHE TEMPERATUUR.

Warmte nodig om de voeding op te warmen van
 $T_1 = 150^\circ\text{C} = 423\text{ K}$ tot $T_2 = 225^\circ\text{C} = 498\text{ K}$

$$\int_{T_1}^{T_2} \sum_i \dot{\Phi}_{m_i} \cdot c_{p_i} dT = \int_{423}^{498} 6333 - \frac{1.0745 \cdot 10^6}{T} dT = 299.6\text{ kW}$$

Warmte productie in de tank:

$$\dot{\Phi}_{\text{mol EO}_0} \cdot \xi_{\text{TANK}} \cdot \Delta H_r = 4.8487 * 84 * \xi$$

\Rightarrow ADIABATISCH BEDRIJF IN DE TANK MET $\xi_T = 73.6\%$

Appendix AL

BIJLAGE 10 : BEREKENING S-CURVE VAN DE TANK.

Molbalans $\phi_{mol u} - \phi_{mol i} = -(-r_A) \cdot V$
 $\xi \cdot \phi_{mol i} = (-r_A) \cdot V$

Warmte productie $\phi_w = \Delta H_r \cdot \xi \cdot \phi_{mol i} = \Delta H_r \cdot (-r_A) \cdot V$

$\phi_w = \Delta H_r \cdot k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot \tau \cdot \phi_{mol EO}$
 $\phi_{mol EO} = \phi_{mol i} / (1 + k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot \tau)$ } \Rightarrow

$\phi_{w prod} = \Delta H_r \cdot \phi_{mol EO i} / (1 + 1 / (k_{\infty} \cdot \exp(\dots) \cdot [GLY] \cdot \tau))$

DOORIEDERE TEMPERATUUR IS BIJ GEGEVEN τ DE WARMTE-
 PRODUCTIE TE BEREKENEN

Appendix AM

BEREKENING VAN DE INVESTERINGSKOSTEN M.B.V. DE METHODE VAN GUTHRIE.

AM.1 Inleiding.

In dit verslag zijn, in het kader van de opdracht bij het vak "De Chemische fabriek" (st 44), door ons de totale investeringskosten van de Ethyleenglycol plant, zoals die beschreven is door de G-groep van februari 1987, bepaald met de methode van K.M. Guthrie. Hierbij is gebruik gemaakt van het door hem geschreven boek "Process plant estimating evaluation and control" (1970). Hiervoor zijn alle kosten in dollars in 1970 bepaald en vervolgens omgerekend naar gulden in 1987. Voor dit omrekenen zijn twee wegen (M1 en M2) te bewandelen, zoals in hoofdstuk 4 is aangegeven. Beide wegen leiden tot andere resultaten. Resultaten van alle twee de manieren worden dan ook gegeven.

Voor de kostenberekening van de totale plant is deze opgedeeld in de volgende blokken:

1. Proceseenheid gas/vloeistof,
2. Terrein,
3. Fabrieksgebouwen,
4. Opslag faciliteiten,
5. Utility plants,
6. Randapparatuur,
7. "Off site" pijpen.

} *ind. kosten ?*

De nummers van de apparaten zoals wij die gebruiken komen overeen met die zoals ze in het processchema van de G-groep vermeld staan. Alle afmetingen van de verschillende apparatuur zijn omgerekend naar Engelse maten (feet, inch, psi), zodat terugzoeken in de grafieken en tabellen van Guthrie eenvoudig is.

AM.2 De Proceseenheid gas/vloeistof.

De proceseenheid gas/vloeistof is verder opgedeeld in:

1. Warmtewisselaars,
2. Process vessels (verticale- en horizontale vaten),
3. Pompen.

In deze zelfde volgorde zullen we nu de investeringskosten van deze apparaten bepalen.

AM.2.1 Warmtewisselaars.

De kosten van de warmtewisselaars worden berekend met behulp van de vergelijking:

$$\text{Warmtewisselaar Cost} = \text{Base Cost} \times (F_d + F_t + F_s) \times F_m. - \text{Exp. C.}$$

Aan de hand van het verwarmend oppervlak en met behulp van de grafiek op pagina 138 van Guthrie, is een schatting gemaakt van de Base Cost. Vervolgens zijn, met behulp van de grafieken op bladzijde 139-142 de correctiefactoren bepaald voor het soort warmtewisselaar (F_d), voor de druk in de pijpen (F_t) en voor de druk aan de mantelzijde (F_s). Voor alle warmtewisselaars is carbon steel als materiaal gekozen, de materiaalfactor F_m wordt hierdoor 1.0.

Behalve de verschillende reboilers en condensoren worden in dit hoofdstuk ook de kosten van het verwarmende gedeelte van de verdampers berekend. De kosten van de bijbehorende vaten zullen in het volgende hoofdstuk berekend worden. Met de nummers van de verdampers in de onderstaande tabel, bedoelen we dus slechts het verwarmende gedeelte van de verdampers. Ditzelfde geldt voor de bijbehorende vaten, bij de berekening van de process vessel cost.

$$\begin{aligned} \text{Total Cost} &= \sum \text{Base} \times F_d + (\text{Exp} - B) \\ &= \text{Base} / F_d + \left\{ (F_d + F_t + F_s) F_m - 1 \right\} \end{aligned}$$

tabel AM.1: Kosten berekening van de warmtewisselaars.

Nr.	V.O. (ft ²)	Base Cost (\$)	Fd	tube press (psi)	Ft	shell press (psi)	Fs	w.w. cost (\$)
H9	1204	10000	0.792	435	0.028	279	0.17	9900
H11	1075	9000	0.793	73	0.023	265	0.16	8784
V13	4698	26000	0.788	36	0.023	73	0.16	25246
V15	6192	31000	0.787	15	0.023	36	0.16	30070
V17	7256	35000	0.787	1	0.023	15	0.16	33950
H19	5268	28000	0.788	1	0.023	15	0.16	27188
H21	172	2800	0.802	5	0.023	15	0.16	2758
H22	384	4800	0.798	7	0.023	279	0.17	4757
H27	32	1000	0.810	441	0.028	221	0.17	1008
H31	1161	9000	0.794	3	0.023	15	0.16	8793
H33	2236	13000	0.792	4	0.023	279	0.17	12805
H36	305	4100	0.799	0.8	0.023	15	0.16	4026
H38	111	2100	0.805	1	0.023	279	0.17	2096
H40	242	3200	0.800	0.4	0.023	15	0.16	3145
H42	210	3100	0.800	0.5	0.023	279	0.17	3078
H45	100	2000	0.805	0.1	0.023	15	0.16	1976
H47	40	1100	0.808	0.3	0.023	279	0.17	1101
H49	65	1700	0.801	0.1	0.023	15	0.16	1673
H51	32	1000	0.809	0.1	0.023	279	0.17	1002
H54	9	1000	0.810	0.1	0.023	15	0.16	993
H56	5	1000	0.810	0.1	0.023	279	0.17	1003

Totaal: \$ 185352

AM.2.2 Process Vessels.

AM.2.2.1 Inleiding.

Volgens Guthrie worden de de kosten van Process Vessels als volgt geschat:

$$\text{Process Vessel Cost} = \text{Base Cost} \times F_m \times F_p.$$

Voor elk apparaat nemen we de materiaalfactor $F_m=1.0$ (carbon steel). De drukfactor F_p volgt uit de werkdruk in ieder apparaat en de gragieken op pagina 150 van Guthrie.

AM.2.2.2 Kosten van de verticale Process Vessels.

Onder de verticale procesvaten verstaan we de kolommen, de vaten van de verdampertrein en het geroerde vat R28. We zullen in deze zelfde volgorde de kosten van de apparatuur bepalen.

tabel AM.2: Kosten berekening van de kolommen.

Nr.	D (ft)	L (ft)	Base Cost (\$)	Press. (psi)	Fp	Vessel Cost (\$)
T20	2.30	39.4	6100	6.53	1.0	6100
T30	7.78	28.1	15000	3.77	1.0	15000
T35	4.59	34.1	10000	0.87	1.0	10000
T39	5.91	34.1	11500	0.73	1.0	11500
T44	3.94	42.6	10300	0.62	1.0	10300
T48	4.27	28.1	7500	0.15	1.0	7500
T53	1.97	18.8	2500	0.10	1.0	2500 +

Totaal: \$ 629000

Voor de schotelkolom T20 moeten de schotelkosten nog berekend worden. Volgens Guthrie (bladzijde 152) worden deze gegeven door:

$$\text{Tray Cost} = \text{Base Cost} \times (\text{Fs} + \text{Ft} + \text{Fm}).$$

Voor een zeefschotel van carbonsteel met een schotelafstand van ongeveer 20", wordt achtereenvolgens $\text{Ft}=0$, $\text{Fm}=0$, $\text{Fs}=1.2$. Met een Base Cost van \$ 7000 (zie de grafiek op blz. 152), wordt de totale schotelkosten van deze kolom: \$ 8400.

Omdat Guthrie geen kostenberekening voor gestructureerde pakkingen heeft, zal gebruik gemaakt worden van de kosten die gegeven worden door de pakking fabrikanten. In het jaar 1987 zijn deze fl. 813000. Zoals gezegd kan het berekenen van de kosten van 1970 naar 1987 op twee manieren plaatsvinden (M1 en M2). Voor de omgekeerde berekening geldt hetzelfde. Aldus teruggerekend naar 1970 bedragen deze kosten: \$ 70692.60 (M1) of \$ 159683 (M2). Hierop wordt nog verder ingegaan in hoofdstuk 4.

tabel AM.3: Kosten berekening van de verdampervaten.

Nr.	D (ft)	L (ft)	Base Cost (\$)	Press. (psi)	Fp	Vessel Cost (\$)
F11	6.56	6.56	4000	73.5	1.12	4480
V13	6.56	6.56	4000	36.8	1.0	4000
V15	11.5	8.20	4500	14.7	1.0	4500
V17	11.5	8.20	4500	1.5	1.0	4500 +

Totaal: \$ 17480

Van het geroerde vat R28 zijn de afmetingen: D=5.9 ft., L=17.4 ft.. De Base Cost worden hierdoor \$ 7500. De druk in dit vat is 220. 5 psi., waardoor Fp= 1.65. De totale kosten van dit vat wordt daardoor \$ 12375.

De totale Vertical Process Cost worden nu:

62900		62900
8400		8400
70692.6	of	159683
17480		17480
12375 +		12375 +
<u>\$ 171847.6</u>		<u>\$ 260839</u>

AM.2.2.3 Kosten van de horizontale Process Vessels.

De pakkingkosten van de reactor R29 worden weer vanuit de prijs van 1987 (fl. 210000.-) teruggerekend naar 1970 (\$ 18242.28 (M1) of \$ 41246 (M2)). Hiermee worden de totale horizontale Vessel Cost:

20310		20310
18242.28 +	of	41246 +
<u>\$ 38552.28</u>		<u>\$ 61556</u>

tabel AM.4: Kosten berekening van de horizontale Process Vessels.

Nr.	D (ft)	L (ft)	Base Cost (\$)	press. (psi)	Fp	Vessel Cost (\$)
M8	0.48	1.91	100	441	2.6	260
R10	1.04	59.0	2000	441	2.6	5200
R29	3.28	87.6	9000	221	1.65	14850 +

Totaal: \$ 20310

AM.2.3 Pompen.

Volgens Guthrie worden de totale Pump Cost bepaald met behulp van de vergelijking:

Total Pump Cost = Process Pump Cost + Driver Cost, waarin

Process Pump Cost = Base Cost x Fm x Fp.

Voor de belangrijkste pompen zijn met behulp van de grafiek op bladzijde 157 de Base Cost verkregen. Met de tabellen op dezelfde pagina zijn de materiaalfactor $F_m=1.38$ (cast steel) en de drukfactor F_p bepaald. De pompaandrijvingskosten komen van bladzijde 169.

tabel AM.5: Kosten berekening van de pompen en aandrijving.

Nr.	V (gpm)	press. (psi)	C/H (gpm x psi)	Base Cost (\$)	Fp	Pump Cost (\$)	BHP	dri. Cost (\$)	Total Cost (\$)
P1	76.1	391.8	29802	2100	1.62	4695	34	700	5400
P2	60.2	362.7	21845	1900	1.62	4248	23	450	4700
P3	71.3	19.3	1377	680	1.0	938	1.3	200	1138
P4	79.2	40.6	3219	820	1.0	1132	3.0	200	1332
P5	90.3	53.7	4850	1000	1.0	1380	4.5	200	1580
P6	3.7	50.1	183	400	1.0	552	0.2	200	772
P7	279.9	380.2	113261	4500	1.62	10060	84	1800	11860
P12	350.2	9.4	3303	850	1.0	1173	2.3	150	1300
P14	272.6	12.3	3362	850	1.0	1173	2.4	150	1300
P16	185.4	14.5	2690	800	1.0	1104	2.0	150	1250
P18	182.3	14.5	2644	800	1.0	1104	2.0	150	1250
P23	4.8	420.8	1999	720	1.62	1609	1.5	150	1750
P24	11.1	420.8	4667	1000	1.62	1380	3.5	150	1500
P25	3.8	391.8	1489	690	1.62	952	1.1	150	1100

Totaal: \$ 36232

AM.2.4 Totale kosten van de proceseenheid gas/vloeistof.

Bovenop de apparaatuurkosten A, zoals deze in de vorige paragrafen berekend zijn, moet nog de materiaal-, de direkte montage-, de indirecte- en de contingency kosten worden opgeteld. De totale apparaatsoort kosten wordt nu gelijk aan:

$$A \times (F_m + F_l) \times F_i \times F_c = A \times F_{tot}.$$

Guthrie geeft (op de bladzijden 144, 154 en 163 voor respectievelijk de warmtewisselaars, de process vessels en de pompen) de factoren F_m , F_l en F_i voor de berekening van achtereenvolgens de materiaal-, de direkte montage- en de indirecte kosten. De arbeidsfactor F_l volgt uit de materiaalfactor F_m en de L/M verhouding. Uit het DACE-boek blijkt dat zowel de Labour als de Material index tussen 1970 en 1987 ongeveer in dezelfde mate zijn toegenomen. Wij nemen voor onze berekeningen dan ook dezelfde L/M verhouding zoals die in Guthrie is gegeven. De contingency factor F_c is volgens Guthrie 1.18.

tabel AM.6: Totale kosten van de gas/vloeistof proceseenheden.

Apparaat soort	Kosten (\$)		Ftot	Totale Apparaatsoort Kosten (\$)	
	M1	M2		M1	M2
w.w.	185352	185352	3.74	693216	693216
vessels H.	171848	260839	4.91	843774	1280720
vessels V.	38552	61556	3.60	138787	221602
pompen	36232	36232	3.89	140943	140943

Totaal: \$ 1816720 | 2336481

AM.3 Offsite facilities.

De berekening van de kosten van de overige blokken (terrein, fabrieksgebouwen, opslag faciliteiten, utility plants, randapparatuur en "off site" pijpen) gaat met behulp van de totale kosten van de proceseenheid gas/vloeistof en factoren voor deze blokken. Deze factoren, die we vinden op bladzijde 84 van Guthrie, zijn algemene waarden voor een chemische fabriek. De kosten van de verschillende blokken staan in de volgende tabel.

tabel AM.7: Berekening kosten van de offsite faciliteiten.

facility	kosten factor	kosten (\$)	
		M1	M2
Terrein	0.065	118087	151871
Fabrieksgebouwen	0.054	98103	126170
Opslag faciliteiten	0.14	254341	327107
Utility plants	0.055	99920	128506
Randapparatuur	0.018	32701	42057
"Off site" pijpen	0.033	59952	77104
Totaal: \$ 663104		852815	

AM.4 De totale plant.

AM.4.1 Berekening van de uiteindelijke investeringskosten.

Door nu de kosten van de proceseenheden en de faciliteiten bij elkaar op te tellen is de fabriek in dollars in 1970 te vinden. Om dit nu om te rekenen naar de huidige prijs in guldens, kan op twee manieren (M1 en M2) geredeneerd worden.

M1: De fabriekskosten uit 1970 rekenen we, met de toen geldende dollarkoers van fl. 3,74 per dollar, om naar guldens in 1970. Vervolgens corrigeren we met het "encost" indexcijfer voor het verloop van de fabriekskosten (in gld.) tussen 1970 en 1987. Deze factor is gevonden in het WEBCI prijzen boekje van 1986 en de tabel in het diktaat "De chemische fabriek", deel 2, blz. III-53 (zie ook appendix AO tabel III). Dit indexcijfer blijkt gestegen te zijn van 51 in 1970 naar 157 in 1987. De totale fabriekskosten worden op deze manier:

$$157 / 51 \times 3.74 \times \text{fabriekskosten in 1970.}$$

M2: De gevonden dollarprijs wordt vermenigvuldigd met het indexcijfer, dat het verloop van de plantkosten in dollars tussen de jaren '70-'87 aangeeft. Dit indexcijfer is gevonden met behulp van de "Chemical engineering" van April 1987 en dezelfde tabel uit het diktaat "De chemische fabriek". Dit indexcijfer is gestegen van 125.7 in 1970 tot 318.4 in 1987. De fabrieksprijs in dollars in 1987 is dus:

318.4 / 125.7 x fabriekskosten in 1970.

Door dit te vermenigvuldigen met de huidige koers van de dollar (fl. 2,01 per dollar) vinden we de totale investeringskosten.

Voor de berekening van de pakking kosten, die van 1987 terugberekend moesten worden naar 1970 (om met dezelfde factoren vermenigvuldigt kunnen worden), zijn deze methoden ook toegepast. Alleen in omgekeerde volgorde.

tabel AM.8: De totale investeringskosten.

methode	proceseenheid	facility	investerings
	kosten (\$)	kosten (\$)	kosten (fl.)
M1	1816720	663104	28.551.040,-
M2	2336481	852815	16.237.855,-

nicl off soks

AM.4.2 Resultaatbespreking.

Er blijkt een aanzienlijk verschil te bestaan tussen de twee berekenings methoden, waarmee de fabriekskosten in 1970 (in dollars) naar 1987 (in guldens) worden omgerekend. De eerste manier (M1) lijkt als schatting reeeler dan de tweede. Doordat de koers van de dollar op dit moment erg laag is, geeft nu omrekenen naar guldens een vertekenend beeld. De dollar staat "te" laag. Hiernaast lijken de prijzen van de verschillende apparaten berekend met Guthrie erg laag. Deze prijzen blijken slecht overeen te komen met de waarden die bijvoorbeeld het WEBCI-boekje geeft. Daarom kan betwijfeld worden of de Amerikaanse prijzen hier in Europa wel gelden.

Voor een verder vergelijk hebben we de door ons berekende kosten van de verschillende apparaten nog vergeleken met de dollarprijs zoals deze in de "Chemical engineering" van April 1982 staat. Deze bleken slechts 10% hoger te zijn dan de waarden van Guthrie uit 1970. Dit zou veel meer moeten zijn, gezien het indexcijfer. Bovendien bleken deze prijzen veel lager dan de prijzen in het WEBCI boekje. Dit was de tweede aanwijzing dat Amerikaanse prijsgegevens bij vergelijk met de Europese markt een vertekenend beeld geven. Met de prijzen uit de Chemical engineering hebben we dan ook niet verder gerekend.

Al met al moet, als schatting voor de kosten van de fabriek, volgens ons meer waarde gehecht worden aan de omrekening met de methode M1. Hierbij moet wel vermeld worden dat omrekening van '70 dollars naar '87 guldens vrij arbitrair is.

Appendix AN

BEREKENING VAN DE INVESTERINGSKOSTEN M.B.V. DE LANG METHODE.

AN.1 Inleiding

Om op een snelle en eenvoudige manier de investeringen in de nieuwbouw van een chemische fabriek te berekenen, is de Lang-methode goed bruikbaar. Hij was vrijwel de eerste die de factorbegrotingsmethode hanteerde (1948). Aan de hand van het processtroomschemakunnen de kosten van alle apparaten berekend worden m.b.v. het WEBCI-boekje. De som van deze kosten moet met een factor 4.74 vermenigvuldigd worden. Deze factor komt voor de betreffende fabriek als volgt tot stand:

1. De kosten van de procesapparatuur franco op de bouwplaats stellen we A.
2. Door kosten voor fundaties, ondersteuning, bordessen, isolatie, en montage van deze apparaten worden de kosten $1,43 * A$.
3. Het procesleidingwerk brengt de kosten in dit geval op $2,79 * A$.
1.60 x 1.43
4. Het bouwrijp maken van het terrein, de gebouwen, elektrische installaties, instrumentatie, verzekering en belastingen maken de kosten $3,43 * A$.
nicht afget. 5 x (3)
5. Onvoorzien, engineering inclusief tijdelijke montagevoorzieningen en montagetoezicht brengen de uiteindelijke kosten op $4,74 * A$.

AN.2 Berekening van de procesapparatuurkosten.

Aan de hand van het WEBCI-boekje van aug.1986 zijn de prijzen van de apparaten bepaald. Hierbij moesten een aantal aannames gedaan worden, omdat niet alle apparaten of onderdelen in dit boekje vermeldt worden:

- De kleinst vermelde centrifugaalpomp verpompt 10 m³/hr. Deze pomp kost f19.000. Er zijn verscheidene pompen met een (veel) kleinere capaciteit gewenst. Bovendien is de drukval vaak heel klein. In al deze gevallen is een horizontale chemiepomp van f10.000 gekozen.
- De verdampers bestaan uit een verticale buizenkolom met een vat eronder. De buizenkolom is gelijk aan een pijpenwarmtewisselaar verondersteld, en bij het gewenste V.O. in het prijzenboekje opgezocht. Voor de vaten zijn cilindrische tanks met bolle fronten genomen.
- Met het Cost Engineers Handbook is de prijs van een schotel geschat. N.a.v. een rekenvoorbeeld hierin is de prijs van een schotel op f1000 geschat.
- Aangezien prijzen van pakkingen niet direct beschikbaar zijn, is met schattingen van prof. de Grauw gewerkt. Deze waren als volgt:

Mella 250 Y pak kost f8.000 per m³, BX pak f45.000, en SMR pak f10.000.
- Voor alle apparaten die met EO in aanraking komen is RVS Alsi 316 L genomen.

In de volgende tabellen zijn alle apparaten met hun kosten beschreven.

tabel AN.1: Apparaatkosten in de 1e reactorsectie.

app	omschrijving	capaciteit	materiaal	prijs
P1	centrif.pomp	20m**3/hr,150mVK	staal,20%Cr	26.565
	centrif.pomp	20m**3/hr,150mVK	staal,20%Cr	26.565
	el.motor	75kW	expl.veilig	13.400
P2	centrif.pomp	20m**3/hr,150mVK	staal/gietijzer	24.150
	centrif.pomp	20m**3/hr,150mVK	staal/gietijzer	24.150
	el.motor	55kW	IP44 gesl.	5.480
P3	centrif.pomp	20m**3/hr,30mVK	staal/gietijzer	16.800
	el.motor	15kW	IP44 gesl.	1.540
P4	centrif.pomp	20m**3/hr,50mVK	staal/gietijzer	18.900
	el.motor	22kW	IP44 gesl.	2.240
P5	centrif.pomp	20m**3/hr,50mVK	staal/gietijzer	18.900
	el.motor	22kW	IP44 gesl.	2.240
P6	centrif.pomp	10m**3/hr,50mVK	staal/gietijzer	17.100
	el.motor	18.5kW	IP44 gesl.	1.870
P7	centrif.pomp	80m**3/hr,150mVK	staal/gietijzer	29.000
	centrif.pomp	80m**3/hr,150mVK	staal/gietijzer	29.000
	el.motor	132 kW	IP44 gesl.	13.200
M8	stat.menger	L=.582m,D=.146m	staal AISI 316L	500
	mengpakking	10 liter		500
H9	stoomw.w.	V.O.=112 m**3	staal AISI 316L	110.000
R10	pijp	18m 2.4.375	staal AISI 316L	16.200
	bocht			3.660
	flenzen			2.400
totaal 1e reactorsectie:				404.360

tabel AN.2: Apparaatkosten in de ontwateringssectie.

app. omschrijving	capaciteit	materiaal	prijs
F11 flasher	V.O.=100m**2	staal	65.000
cylindr.vat	D=2,3m,L=2,1m		35.000
P12 centrif.pomp	100m**3/hr,30mvk	staal/gietijzer	21.600
el.motor	55 kW	IP44 gesl.	5.480
V13 filmverdamper	V.O.=437m**2	staal	175.000
cylindr.vat	D=2,3m,L=2,1m		35.000
P14 centrif.pomp	100m**3/hr,30mvk	staal/gietijzer	21.600
el.motor	55 kW	IP44 gesl.	5.480
V15 filmverdamper	V.O.=573m**2	staal	200.000
cylindr.vat	D=3m,L=5,2m		58.000
P16 centrif.pomp	60m**3/hr,30mvk	staal/gietijzer	19.200
el.motor	37,5 kW	IP44 gesl.	3.700
V17 filmverdamper	V.O.=675m**2	staal	220.000
cylindr.vat	D=3,5m,L=3,5m		77.000
P18 centrif.pomp	60m**3/hr,30mvk	staal/gietijzer	19.200
el.motor	37,5 kW	IP44 gesl.	3.700
H19 condensor	V.O.=490m**2	staal	190.000
T20 schotelkolom	D=1m,L=10m	staal HII	75.000
19 schotels			19.000
H21 condensor	V.O.=16m**2	staal	23.500
H22 reboiler	V.O.=37,5m**2	staal	35.000
Totale apparaatkosten ontwateringssectie:			1.248.920

tabel AN.3: Apparaatkosten in de 2e reactorsectie.

app. omschrijving	capaciteit	materiaal	prijs
P23 centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
el.motor	22kW		2.240
P24 centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
el.motor	22kW		2.240
P25 centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
centrif.pomp	1m**3/hr 150mvk		10.000
el.motor	22kW		2.240
H27 warmtewiss.	6m**2	roestvast	35.000
	1m**2	r.v.s.pijpen	15.000
R28 2e reactor	13 m**3,15bar	AlSi 316L	200.000
R29 buisreactor	D=1,4m L=13,6m	AlSi 316L	70.000
SMR pakking	21m**3		210.000
Totale apparaatkosten van de 2e reactorsectie:			596.700

tabel AN.4: Apparaatkosten in de glycolendestillatiesectie.

app. omschrijving	capaciteit	materiaal	prijs
T30 1e MEG/DEG kol.	D=2,5m H=10m	staal	132.000
Mella pakking	24,28m**3		194.240
H31 condensor	V.O.=108m**2	staal	70.000
P32 centrif.pomp			8.000
el.motor			1.000
H33 reboiler	V.O.=208m**2	staal	100.000
P34 centrif.pomp	20m**3/hr 30mVK	staal/gietijzer	16.800
el.motor	22 kW		2.240
T35 2e MEG/DEG kol.	D=1,5m H=10m	staal	94.000
Mella pakking	9,15m**3		73.200
H36 condensor	V.O.=28,4m**2	staal	30.000
P37 centrif.pomp			8.000
el.motor			1.000
H38 reboiler	V.O.=10,3m**2	staal	21.000
vat	D=1,8m L=1,7m	staal	23.000
T39 1e DEG/TEG kol.	D=2,0m L=10m	staal	115.000
Mella pakking	16,90m**3		135.000
H40 condensor	V.O.=22,5m**2	staal	26.500
vat	D=2,3m L=2,1m	staal	30.000
P41 centrif.pomp			7.000
el.motor			1.000
H42 reboiler	V.O.=19,5m**2		25.000
P43 centrif.pomp			7.000
el.motor			1.000
T44 2e DEG/TEG kol.	D=1,0m L=15,0m	staal	105.000
Mella pakking	9,61m**3		76.800
H45 condensor	V.O.=6,9m**2	staal	19.500
P46 centrif.pomp			6.000
el.motor			1.000
H47 reboiler	V.O.=3,7m**3	staal	16.000
vat	D=1,8m L=1,7m		23.000
T48 1e TEG/HEG kol.	D=1,5m L=10m	staal	94.000
Mella pakking	6,56m**3		52.480
H49 condensor	V.O.=4,5m**2	staal	17.000
P50 centrif.pomp			5.000
el.motor			500
H51 reboiler	V.O.=3,0m**3	staal	15.500
vat	D=1,8m L=1,7m		23.000
P52 centrif.pomp			7.000
el.motor			1.000
T53 2e TEG/HEG kol.	D=0,5m L=5,0m	staal	35.000
BX pakking	0,6m**3		27.000
H54 condensor	V.O.=0,8m**2	staal	10.000
P55 centrif.pomp			5.000
el.motor			500
H56 reboiler	V.O.=0,5m**3	staal	10.000

vat	D=1,0m L=1,1m	14.000
P57 centrif.pomp		5.000
el.motor		1.000

Totale apparaatkosten glycolendestillatiesectie:		1.691.460

AN.3 Berekening van de totale plant kosten.

Alle apparaatkosten uit deze 4 tabellen bij elkaar opgeteld geeft een totaal van f3.941.440. Met de Lang factor van 4,74 komt het totaal te investeren bedrag op f18.700.000.

Een iets verfijndere methode maakt gebruik van een variabele Langfactor, die afhangt van de gemiddelde apparaatkosten. Deze zijn $F3.941.440 / 57 = f69.000$. De Lang factor wordt dan $10 * 69.000^{*-0,22} = 3,937$. Dit brengt het totaal te investeren bedrag op f15.520.000.

Ex J^sis

Appendix A0

BEREKENING VAN DE INVESTERINGSKOSTEN M.B.V. DE MILLER METHODE

A0.1 Inleiding

De investeringen die nodig zijn, voor het van de grond af, opbouwen van de fabriek, moeten worden berekend. Om tot het investeringsbedrag te komen, zijn er verschillende methoden voorhanden. Wij gebruiken hier de factor methode van C.A.Miller.

Miller verdeelt de fabriek in vier secties, namenlijk:

1. Procesinstallatie (battery limit)
2. Hulpdiensten (gas, lucht, water, electriciteit, etc.)
3. Opslag en verlading.
4. Overhead.

De berekening gaat als volgt:

Eerst worden de procesinstallatie kosten (B-L) uitgerekend met gemodificeerde Lang-factoren (zie tabel 1). Daarna worden de investeringen van de onder 2, 3 en 4 genoemde sectoren verkregen als gegeven percentages van de B-L kosten (zie tabel2).

A0.2 Bepaling Investeringsbedrag.

Uit de, met de in de Lang-methode bepaalde kosten van de installatie komt, dat de totale kosten bedragen fl. 3.941.440,--. Het aantal apparaten bedraagt 57. De gemiddelde apparatuur kosten zijn dus fl. 69.148,--. De in tabel 1 gegeven factoren hebben betrekking op de U.S.dollar van het jaar 1958. De huidige prijzen moeten dus worden teruggerekend naar 1958 en omgezet worden in dollars.

De koers op dit moment (mei 1987) is twee gulden. De gemiddelde apparatuur kosten worden dus \$ 34.574,--. We moeten de prijzen verder aanpassen met een index-factor.

Ratio factors for estimating battery-limit costs

Range of Factors as Percent of Basic Equipment

		AVERAGE UNIT COST OF M P I IN 1958 DOLLARS						
		UNDER \$3,000	3,000 to 5,000	5,000 to 7,000	7,000 to 10,000	10,000 to 13,000	13,000 to 17,000	OVER 17,000
BASIC EQUIPMENT Delivered to site, excluding sales taxes & catalyst	M P I (Main plant items) *	X	X	X	X	X	X	X
	M U E (Miscellaneous unlisted items) Early (lowheat stage) Scope of work well defined	20 to 10% of M P I 's in all categories 10 to 1% of M P I 's in all categories						
	NOTE: Top of ranges: Complicated processes Many process steps Bottom of ranges: Simple processes Few process steps							
	BASIC EQUIPMENT = M P I + M U E	100	100	100	100	100	100	100
FIELD ERECTION OF BASIC EQUIPMENT	High percentage of equipment involving high field labor	23/18	21/17	19.5/16	18.5/15	17.5/14.2	16.5/13.5	15.5/13
	AVERAGE (Mild steel equipment) High percentage of corrosion materials and other high unit-cost equipment involving little field erection	18/12.5	17/11.5	16/10.8	15/10	14.2/9.2	13.5/8.5	13/8
		12.5/7.5	11.5/6.7	10.8/6	10/5.5	9.2/5.2	8.5/5	8/4.8
EQUIPMENT FOUNDATIONS AND STRUCTURAL SUPPORTS	HIGH - Predominance of compressors or mild steel equipment requiring heavy fdns.			17/12	15/10	14/9	12/8	10.5/6
	AVERAGE - For mild steel fabricated equipment			12.5/7	11/6	9.5/5	8/4	7/3
	AVERAGE - For predominance of alloy and other high unit-price fabricated equipment	7/3	8/3	8.5/3	7.5/3	6.5/2.5	5.5/2	4.5/1.5
	LOW - Equipment more or less sitting on floor PILING OR ROCK EXCAVATION	5/0	4/0	3/0	2.5/0	2/0	1.5/0	1/0
		Increase above values by 25 to 100%						
PIPING includes ductwork excludes insulation	HIGH - Gases and liquids, petrochemicals, plants with substantial ductwork	105/65	90/58	80/48	70/40	58/34	50/30	42/25
	AVERAGE FOR CHEMICAL PLANTS Liquids, electrolytic plants	65/33	58/27	48/22	40/16	34/12	30/10	25/9
	LIQUIDS AND SOLIDS	33/13	27/10	22/8	16/6	12/5	10/4	9/3
	LOW - Solids	13/5	10/4	8/3	6/2	5/1	4/0	3/0
INSULATION OF EQUIPMENT ONLY	VERY HIGH - Substantial mild steel equipment requiring lagging and very low temperatures	12/10	11.5/8.5	10/7.4	9/6.2	7.8/5.3	6.8/4.5	5.8/3.5
	HIGH - Substantial equipment requiring lagging and high temperatures (petrochemicals)	10.3/7.5	9/6.3	7.8/5.2	6.7/4.2	5.7/3.4	4.7/2.8	4.8/2.5
	AVERAGE FOR CHEMICAL PLANTS	7.8/3.4	6.5/2.6	5.5/2.1	4.5/1.7	3.6/1.4	2.9/1.1	2.2/0.8
	LOW	3.5/0	2.7/0	2.2/0	1.8/0	1.5/0	1.2/0	1/0
INSULATION OF PIPING ONLY	VERY HIGH - Substantial mild steel piping requiring lagging and very low temperatures	22/16	19/13	16/11	14/9	12/7	9/5	6/3.5
	HIGH - Substantial piping requiring lagging and high temperatures (petrochemicals)	18/14	15/12	13/10	11/8	9/6	7/4	4.5/2.5
	AVERAGE FOR CHEMICAL PLANTS	16/12	14/10	12/8	10/6	8/4	6/2	4/2
	LOW	14/8	12/6	10/5	8/4	6/3	4/2	2/1
ALL ELECTRICAL except building lighting and instrumentation	ELECTROLYTIC PLANTS (includes rectification equipment)		55/42	50/38	45/33	40/30	35/26	
	Plants with mild steel equipment, heavy drives, solids	26/17	22.5/15	19.5/12.5	17/10	14/8.5	12/7	10/6
	Plants with alloy or high unit-cost equipment, chemical and petrochemical plants NOTE: Above figures include 1 to 3% for B/L outside lighting which is not covered in Building Services	18/9.5	15.5/8.5	12/6.5	11/5.5	9/4.5	7.3/3.5	6/2.5

Tabel I. A

* MPI include pumps

Ratio factors for estimating battery-limit costs

		AVERAGE UNIT COST OF M P I IN 1958 DOLLARS																																																																			
		UNDER \$3,000	3,000 to 5,000	5,000 to 7,000	7,000 to 10,000	10,000 to 13,000	13,000 to 17,000	OVER 17,000																																																													
INSTRUMENTATION	Substantial instrumentation, central control panels, petrochemicals		58/31	46/24	37/18	29/13	23/10	18/7																																																													
	MISCELLANEOUS CHEMICAL PLANTS		32/13	26/10	20/7	15/5	11/3	8/2																																																													
	Little instrumentation, solids		21/9	17/7	13/5	10/3	7/2	5/1																																																													
	NOTE: Total instrumentation cost does not vary a great deal with size and hence is not readily calculated as a percent of Basic Equipment. This is particularly true for distillation systems. If in doubt, detailed estimates should be made.																																																																				
MISCELLANEOUS	Includes site preparation, painting & other items not accounted for above	Top of range: large complicated processes Bottom of range: smaller, simple processes	RANGE FOR ALL VALUES OF BASIC EQUIPMENT 6 to 1%																																																																		
BUILDINGS - ARCHITECTURAL & STRUCTURAL (excludes bldg. services)	NOTE: When building specifications and dimensions are known, a high-speed building cost estimator is recommended especially if buildings are a significant item of cost. If separate estimate is not possible, evaluate the buildings as follows before selecting the factors.																																																																				
	<table border="1"> <thead> <tr> <th colspan="5">BUILDING EVALUATION</th> <th colspan="3">when most of process units are located inside buildings</th> </tr> <tr> <th rowspan="2">QUALITY OF CONST.</th> <th>HIGH Brick and Steel</th> <th colspan="2">MEDIUM</th> <th>LOW Economical</th> <th colspan="3">EVALUATION</th> </tr> <tr> <th>+4</th> <th colspan="2">+2</th> <th>0</th> <th colspan="3"></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td rowspan="2">TYPE OF EQUIPMENT</td> <td>VERY HIGH UNIT COST EQUIPMENT</td> <td>MOSTLY ALLOY STEEL</td> <td>MIXED MATERIALS</td> <td>MOSTLY CARBON STEEL</td> <td colspan="3"></td> </tr> <tr> <td>-3</td> <td>-2</td> <td>-1</td> <td>0</td> <td colspan="3"></td> </tr> <tr> <td rowspan="2">OPERATING PRESSURES</td> <td colspan="2">VERY HIGH</td> <td>INTERMED.</td> <td colspan="2">ATMOS.</td> <td colspan="2"></td> </tr> <tr> <td colspan="2">-2</td> <td>-1</td> <td colspan="2">0</td> <td colspan="2"></td> </tr> <tr> <td colspan="8">BUILDING CLASS = ALGEBRAIC SUM =</td> </tr> </tbody> </table>								BUILDING EVALUATION					when most of process units are located inside buildings			QUALITY OF CONST.	HIGH Brick and Steel	MEDIUM		LOW Economical	EVALUATION			+4	+2		0				TYPE OF EQUIPMENT	VERY HIGH UNIT COST EQUIPMENT	MOSTLY ALLOY STEEL	MIXED MATERIALS	MOSTLY CARBON STEEL				-3	-2	-1	0				OPERATING PRESSURES	VERY HIGH		INTERMED.	ATMOS.				-2		-1	0				BUILDING CLASS = ALGEBRAIC SUM =							
	BUILDING EVALUATION					when most of process units are located inside buildings																																																															
	QUALITY OF CONST.	HIGH Brick and Steel	MEDIUM		LOW Economical	EVALUATION																																																															
+4		+2		0																																																																	
TYPE OF EQUIPMENT	VERY HIGH UNIT COST EQUIPMENT	MOSTLY ALLOY STEEL	MIXED MATERIALS	MOSTLY CARBON STEEL																																																																	
	-3	-2	-1	0																																																																	
OPERATING PRESSURES	VERY HIGH		INTERMED.	ATMOS.																																																																	
	-2		-1	0																																																																	
BUILDING CLASS = ALGEBRAIC SUM =																																																																					
		BLDG. CLASS	AVERAGE UNIT COST OF M P I IN 1958 DOLLARS																																																																		
			UNDER \$3,000	3,000 to 5,000	5,000 to 7,000	7,000 to 10,000	10,000 to 13,000	13,000 to 17,000	OVER 17,000																																																												
	MOST OF PROCESS UNITS INSIDE BUILDINGS	+2 +1 to -1 -2	92/68 72/49 50/37	82/61 62/43 44/33	74/56 56/38 40/29	67/49 51/33 35/25	59/44 45/29 30/21	52/36 41/26 27/18	46/33 36/21 23/15																																																												
	OPEN-AIR PLANTS WITH MINOR BUILDINGS		37/16	32/13	28/11	24/8	20/6	17/4	14/2																																																												
BUILDING SERVICES	NOTE: The following factors are for Battery Limit (process) buildings only and are expressed in percent of the Building-Architectural & Structural cost. They are not related to the Basic Equipment cost.																																																																				
			HIGH	NORMAL	LOW																																																																
		Compressed air for general service only		4	1 1/2	5																																																															
	Electric lighting		18	9	5																																																																
	Sprinklers		10	6	3																																																																
	Plumbing		20	12	3																																																																
	Heating		25	16	8																																																																
	Ventilation: without air conditioning		18*	8	0																																																																
	with air conditioning		45	35	25																																																																
	TOTAL OVER-ALL AVERAGE*		85	55	20																																																																
	<p>The above factors apply to those items normally classified as building services. They do not include:</p> <ol style="list-style-type: none"> Services located outside the building such as sub-stations, outside sewers, outside water lines, etc., all of which are considered to be outside the Battery Limit, as well as outside the building. Process services. <p>* The totals provide the ranges for the type of building involved and are useful when the individual service requirements are not known. Note that the over-all averages are not the sum of the individual columns.</p>																																																																				

Tabel I B

Storage and handling in percent of battery-limit cost				B/L Addition		
	Grass Roots		on Existing			
	Plant	Site	Site			
	%		%			
Low: Raw material by pipeline. Little warehouse space	2	0	0			
Avg.: Average raw-material storage & finish-product warehousing	15-25	2-6	2-6			
High: Tank farm for raw-material. Substantial warehousing for finished product	70	20	20			

Services in percent of (B/L + S&H + U)				Range for		
	Grass Roots		Grass Roots			
	Low	High	Low	Avg.	High	
Main office			1	3		
Laboratories			0	2.8		
Shops & stores			1	8		
Lunch rooms			0	2.2		
Change houses			0	2.2		
Personnel & gatehouses			0	1		
Roads, railroads & fences			1.3	5.5		
Service equipment			0.5	4.5		
Miscellaneous			0.5	2		
Over-all averages for total services	5	10-16	0	2-6	15	

Utilities in percent of battery-limit cost				Range for		
	Grass Roots		B/L Additions			
	Low	High	Low	Avg.	High	
Utilities buildings			3	10		
Arch'l. & struct'l.		2-7				
Mechanical services		0.5-4				
Compressed air system			0.1	4		
Electrical systems			1.5	6		
Substation		0.5-3.5				
Distribution		0.5-3				
Outside lighting		0.15-1.5				
Gas system			0	0.6		
Sewers & drainage system			1.3	3.5		
Steam system			1.5	11		
Generation		1-9				
Distribution		0.5-3				
Water system			1	10		
Pumphouse		1-8				
Cooling towers & retira.		0.5-5				
Distribution		0.15-3				
Fire protection		0.2-1				
Water treatment		0.2-1.5				
Miscellaneous			0.5	3		
Over-all averages for all utilities	10	20-30	30	3	6-14	30

Tabel II

Jaar	M & S instal- led equipment index 1926 = 100 (Process ind.)	Chem. Eng. Plant Cost Index (USA) 1957/59=100	PE Composi- te Plant Con- str. Cost (UK) Jan.1970=100 *in Juni '79 is 1975=100 genomen.	Preisindex (W.Dtsl.) 1962 = 100 *sinds 1980 is 1976 = 100 geno- men.	Encost voor Nederl. 1975 = 100
1950	167	73,9	41,7	53,5	
1951	178	80,4	48,8	63,7	
1952	179	81,3	53,5	72,7	
1953	181	84,7	52,6	74,3	
1954	184	86,1	54,1	74,3	
1955	189	88,3	59,4	77,0	
1956	206	93,9	62,5	80,7	
1957	224	98,5	64,4	84,5	
1958	228	99,7	65,7	88,2	
1959	232	101,8	67,5	88,8	
1960	237	102,0	68,2	91,4	
1961	236	101,5	69,7	95,5	
1962	237	102,0	70,9	100,0	
1963	238	102,3	72,0	101,1	
1964	241	103,2	74,3	104,6	
1965	244	104,0	77,0	108,7	
1966	252	107,2	81,6	111,1	
1967	263	109,7	83,0	107,8	
1968	273	113,7	80,0	102,8	
1969	285	119,0	92,7	110,1	
1970	303	125,7	105	125,7	51
1971	321	132,2	115	135,5	60
1972	332	137,2	125	140,0	67
1973	344	144,1	138	146,6	70
1974	398	165,4	168	158,3	78
1975	444	182,4	218	166,8	100
1976	472	192,1	281	175,8	109
1977	505	204,1	310	185,4	114
1978	545	218,8	338	191,6	122
1979	599	238,7	170*	200,8	118
1980	660	261,2	195	125,3*	124
1981	721	297,0	215	132,9	131
1982	746	314	235	140,5	142
1983	...	316	248	144,4	154
1984	147,2	157

Indexcijfers van enkele kostenindices

Tabel III.

Verschillende index-factoren zijn gegeven in tabel 3. We maken vanaf 1958 tot 1975 gebruik van de Chem.Eng.Plant cost index (U.S.A.) omdat:

- Deze betrekking heeft op de bouw van een chemische fabriek.
- Deze teruggaat naar het jaar 1958.

Vanaf 1975 maken we gebruik van de Encost-index, omdat deze betrekking heeft op Nederland, maar pas vanaf 1970 berekend wordt en 1975 het basisjaar (100) is.

We schatten de Encost index-factor voor 1987 op 165. De totale index-factor van 1958 tot en met 1987 wordt nu :

$$(182.4/99.7) * (165/100) = 3.02$$

De gemiddelde apparatuur kosten uitgedrukt in U.S.dollars van 1958 worden nu \$ 11.448,--. We komen dan in de vijfde kolom van tabel 1 terecht.

AO.3

De totale B-L kosten worden 218.5 * M.P.I. = \$ 25.014,--. Voor opslag en verlading geldt: er wordt van de grond af opgebouwd en er is een gemiddelde opslagcapaciteit en magazijnruimte. Daar wordt dan voor genomen 20% van de B-L.

Voor de bedrijfsmiddelen geldt: van de grond af opgebouwd, gemiddeld. Daarvoor nemen wij 25%.

Hieruit volgt: B-l + O.V. + B = \$ 36.270,--. De diensten bedragen 13% van het totaal. De totale investerings kosten per geïnstalleerd apparaat bedragen dan \$ 40.985,--.

Dit is nog gebaseerd op dollars van 1958. We moeten dit bedrag nog vermenigvuldigen met de index-factor, de dollar koers en het aantal apparaten om op de totale investeringskosten te komen. Deze bedraagt dan:

$$40.985,-- * 3.02 * 2 * 57 = 14.110.000,-- \text{ gulden}$$

Het totale investerings bedrag berekend volgens de Miller methode komt dus uit op fl. 14.110.000,--.

Appendix AP

BEREKENING VAN DE INVESTERINGSKOSTEN M.B.V. STAPMETHODEN.

De investeringskosten van de glycolfabriek zijn bepaald met drie stapmethoden:

- Taylor
- Wilson
- Bergman

Bij deze methoden is de benodigde informatie over de verschillende apparaten gering. Voor alledrie de methoden diende de doorzet per apparaat bepaald te worden. (in ton/jaar voor de methoden van Wilson en Taylor, in kmol/heure voor de methode van Bergman) Verder dienen, per apparaat, gegevens beschikbaar te zijn over de temperatuur, de druk, soort materiaal en verblijftijden.

De methode van Taylor gaat uit van de volgende formule:

$$I = 45 * f * P * C / 300$$

I = investeringskosten in 1000 ponden

C = index €310 *juin 78*

P = capaciteit kton/jaar

f = costliness index, die bepaald is in tabel 1

Deze investeringsformule geldt voor 1978. Om de investeringskosten uit 1978 om te rekenen naar kosten in 1987 vermenigvuldigen we met indexcijfer 0.754. (tabel III-53, dictaat chemosche fabriek)

Voor de investeringskosten, berekend met Taylor vinden we dan

$$I = 45 * 16.78 * 172.6 * 310 / 300 = 5.82 \text{ miljoen (1978)}$$

$$I = 0.754 * 20.9 * 10 \text{ EE6} = 15.7 \text{ miljoen gulden (1987)}$$

De methode van Wilson gaat uit van de formule :

$$I = f * AUC * F(p) * F(t) * F(m)$$

I = investeringskosten per apparaat in 1000 ponden
AUC = eenheidskosten per apparaat (average unit cost)
f = investeringsfactor (lang-factor)
F(p) = drukfactor
F(t) = temperatuurfactor
F(m) = materiaalfactor

In tabel 2. zijn deze factoren en investeringskosten per apparaat aangegeven. Deze berekende investeringskosten gelden voor het jaar 1971. Om de kosten in 1987 te vinden vermenigvuldigen we met indexcijfer 2.22. (tabel III-53, dictaat chemische fabriek)

Voor de investeringskosten, berekend met Wilson, vinden we :

$$\begin{aligned} I &= 2.58 \text{ miljoen pond} \quad (1971) \\ I &= 2.58 * 2.22 = 5.73 \text{ miljoen pond} \quad (1987) \\ I &= \underline{20.6 \text{ miljoen gulden.}} \end{aligned}$$

Bij de methode van Bergman worden de investeringskosten per apparaat bepaald uit figuren. (zie fig.1 t/m fig.7). In tabel 3. zijn de benodigde gegevens en de daaruit volgende investeringskosten aangegeven.

Voor de investeringskosten, berekend met Bergman, vinden we:

$$\begin{aligned} I &= 46.86 \text{ miljoen franc (franse franc)} \quad (1987) \\ I &= \underline{18 \text{ miljoen gulden.}} \end{aligned}$$

Samengevat vinden we voor de investeringskosten ,van de glycolfabriek, bepaald met de drie stapmethoden :

- methode van Taylor : $I_T = 15.7$ miljoen gulden.
- methode van Wilson : $I_W = 20.6$ miljoen gulden.
- methode van Bergman : $I_B = 18$ miljoen gulden.

Ingaande stromen per afzonderlijk apparaat.

App. nummer	doorzet norm. score		verblijftijd uren score		toeslag aard score	druk Bar	score	Totaal score
M8	4	2.5	0	0	0	30	1.5	4
H9	4	2.5	0	0	exp. 1	30	1.5	5
R10	4	2.5	0	0	exp. 1	30	1.5	5
F11	4	2.5	0	0	0	5	0.5	3.6
V13	3.5	2.2	0	0	0	5	0.5	2.7
V15	2.75	1.8	0	0	0	2	0.2	2
V17	2.93	1.9	0	0	0	1	0	1.9
H19	1	0	0	0	0	0.1	1	1
T20	1	0	0	0	0	0.25	0.6	0.6
M26	0.2	-3	0	0	exp. 1	15	1.1	-0.9
H27	0.2	-3	0	0	exp. 1	15	1.1	-0.9
R28	0.2	-3	3.3	0.15	exp. 1	15	1.1	-0.75
R29	0.2	-3	4.4	0.70	exp. 1	15	1.1	-0.2
T30	0.95	-0.01	0	0	0	0.23	0.9	0.8
T35	0.3	-2.1	0	0	0	0.06	1.45	-0.65
T39	0.25	-2.7	0	0	0	0.032	1.8	-0.9
T44	0.09	-3	0	0	0	0.012	2	-1
T48	0.07	-3	0	0	0	0.006	2	-1
T53	0.02	-3	0	0	0	0.004	2	-1

Ingaande stromen voor de hele plant.

EO	0.73	-0.68	-0.68
H2O	0.27	-2.5	-2.5

Recyclen stromen.

H2O	2.9	1.9	1.9
MEG	0.2	-3	-3
			15.58

f=

Tabel 1 .Stap methode van Taylor.

app. nummer	jaar doorzet kTon/jaar	f	AUC k £/jaar	Fd	Ft	Totaal k £/jaar
M8	699.2	1.7	120	1.08	1.06	233.5
H9	699.2	1.7	120	1.08	1.07	235.7
R10	699.2	1.7	120	1.08	1.09	240.1
F11	699.2	1.7	120	1	1.07	218.3
V13	600.9	1.7	110	1	1.07	200.1
V15	478.3	1.7	95	1	1.07	172.8
V17	505.1	1.7	75	1	1.06	135.2
H19	162	1.8	47	1.05	1.04	92.4
T20	175.4	1.8	47	1	1.06	89.7
H21	10.7	1.9	7	1	1.05	14
H22	380	1.7	80	1	1.07	145.5
M26	35.8	2.1	16	1.08	1.06	38.5
H27	35.8	2.1	16	1.08	1.07	38.8
R28	35.8	2.1	16	1.06	1.09	38.8
R29	35.8	2.1	16	1.06	1.08	38.5
T30	166.4	1.8	46	1	1.07	88.6
H31	34.5	1.8	16	1	1.07	30.8
H33	239.5	1.8	58	1	1.07	111.7
T35	58.6	1.8	23	1.08	1.07	47.8
H36	17.3	1.9	10	1.09	1.07	22.2
H38	68.8	1.8	25	1.08	1.06	51.5
T39	43.6	1.8	19	1.1	1.07	40.3
H40	46.9	1.8	20	1.11	1.07	42.8
H42	73.3	1.8	26	1.1	1.07	55.1
T44	16.3	1.9	9.5	1.16	1.07	22.4
H45	10.4	1.9	7	1.28	1.07	18.2
H47	24.4	1.9	13	1.14	1.06	29.6
T48	12.6	1.9	8.3	1.28	1.07	21.6
H49	11.2	1.9	7.5	1.37	1.07	20.9
H51	14.5	1.9	9	1.21	1.07	22.1
T53	3.7	2	3.4	1.33	1.07	9.7
H54	1.7	2	2.1	1.43	1.06	6.4
H56	4.4	2	3.9	1.28	1.08	10.8

+
2584.6 k£/jaar

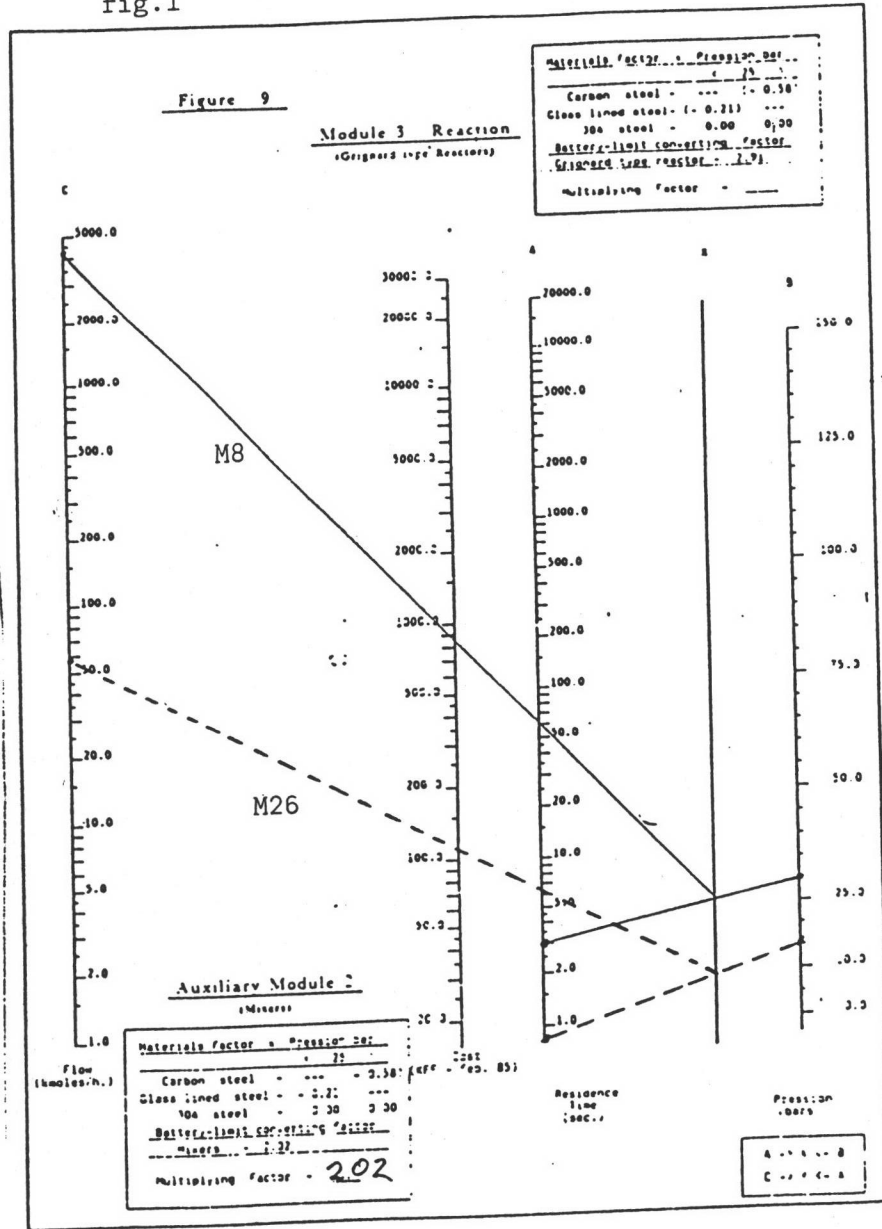
Tabel 2 . Stap methode van Wilson.

wilson
semio doorzet semio
 $33 \times 75kP = 2,98 \text{ MR} \times 1,07 \times 1,1 = 2,93 \text{ MR}$

app. nummer	doorzet kmol/h	druk Bar	verblijf -tijd s			kosten kFF	B.L. factor	totaal kFF
M8	4197	30	2.7			850	2.02	1700
M26	59.7	15	0.66			120	2.02	240
			duty Mkcal/h	warm.coeff Kcal/hm ² 'C	LMTD 'C			
H9	4197	30	5.4	560	85	60	3.04	182
H27	45	15	0.085	206	70	15	3.04	45
			verblijf -tijd s	warmte kcal/gmol				
R10	4197	30	47	20		1100	3.5	3850
R29	45	15	1600			2700	3.5	9450
				roerder pK				
R28	59.7	15	1200	20		840	3.75	3150
F11	3855.6	5	30			700	2.32	1624
			duty Mkcal/h	dT 'C	Tmax 'C			
V13	3189.6		7.96	20	100	2500	2.25	5625
V15	2355.6		9.84	20	100	2700	2.25	6075
V17	1397		11.2	20	100	3000	2.25	6750
H19	386		0.57	20.5	46	1000	2.25	2250
		druk mBar	alfa	lichte sl molprocent				
T20	386	250	40	0.16		600	3.4	2040
T30	324	230	5.9	0.95		500	3.4	1700
T35	34.5	60	6.3	0.55		150	3.4	510
T39	46.2	32	3.2	0.88		230	3.4	782
T44	14.3	12	3.5	0.3		150	3.4	510
T48	10	6	7	0.82		60	3.4	204
T53	2.6	4	7	0.3		50	3.4	170
								+ 46857 kFF

Tabel 3 .Stap methode van Bergman.

fig.1 MENER M8 , M26



246 P

fig.2 REACTOREN R10 , R29

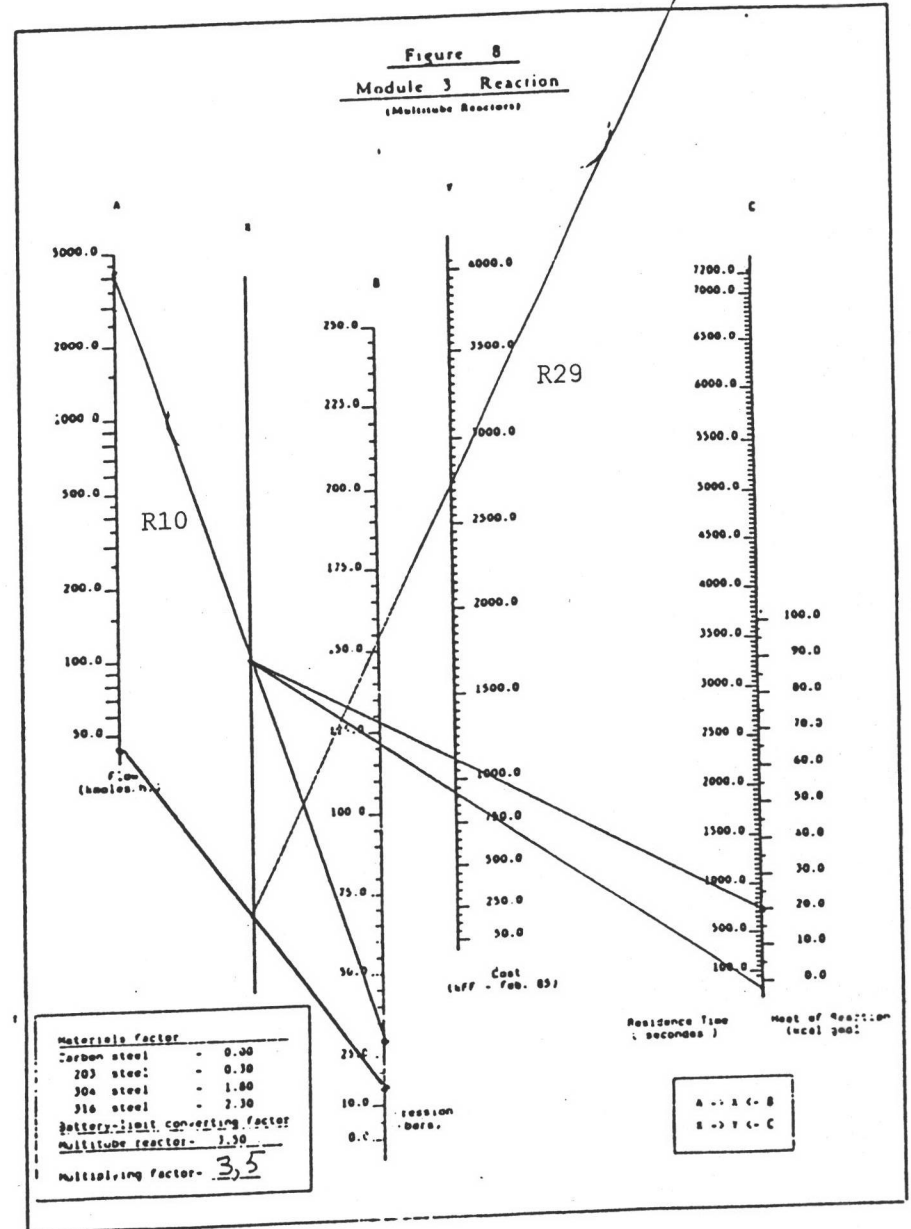
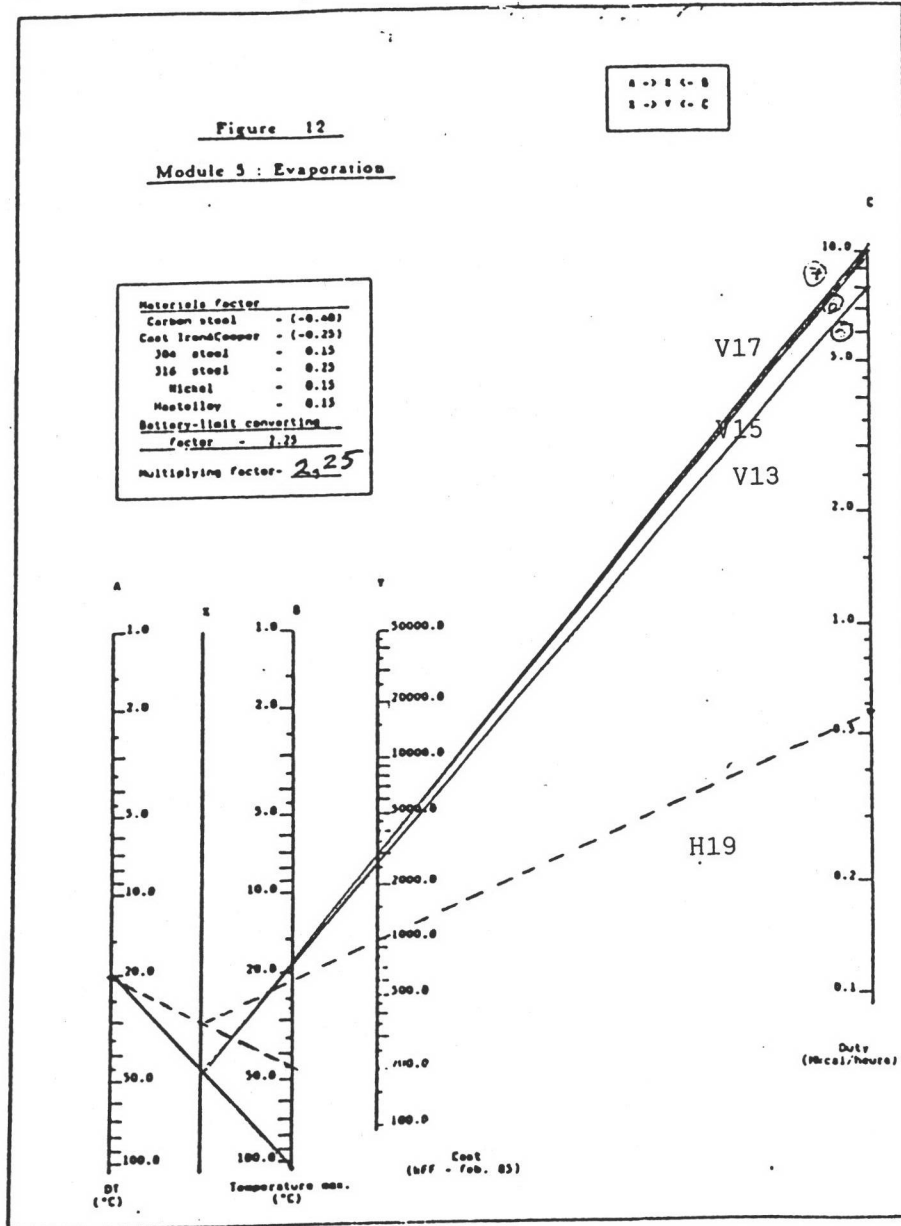


fig.3 VERDAMPERS V13, V15, V17, CONDENSATOR H19



246 ← e

fig.4 WARMTEWISSELAARS H9, H27

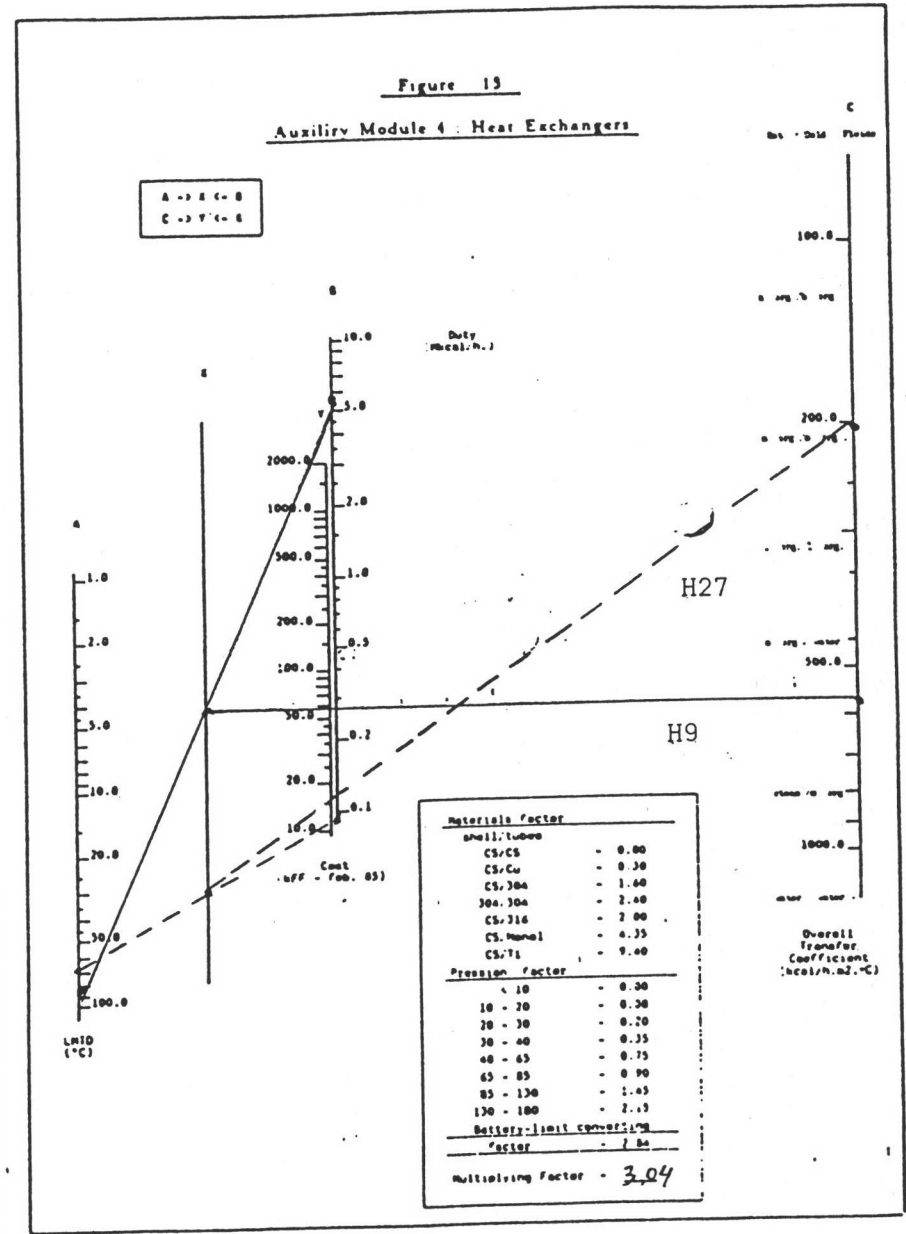


fig.5 FLASCHER F11

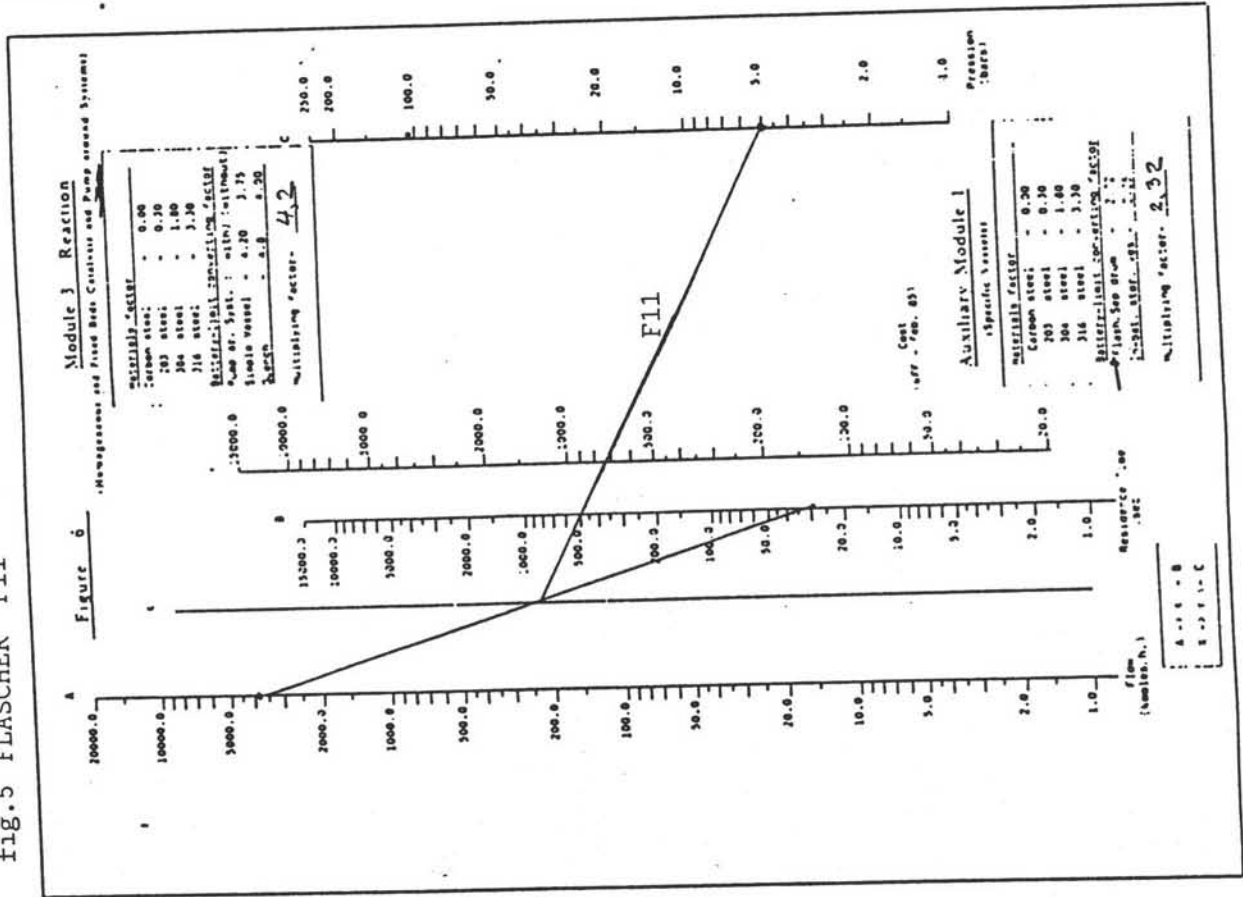


fig.6 GEROERDE REACTOR R28

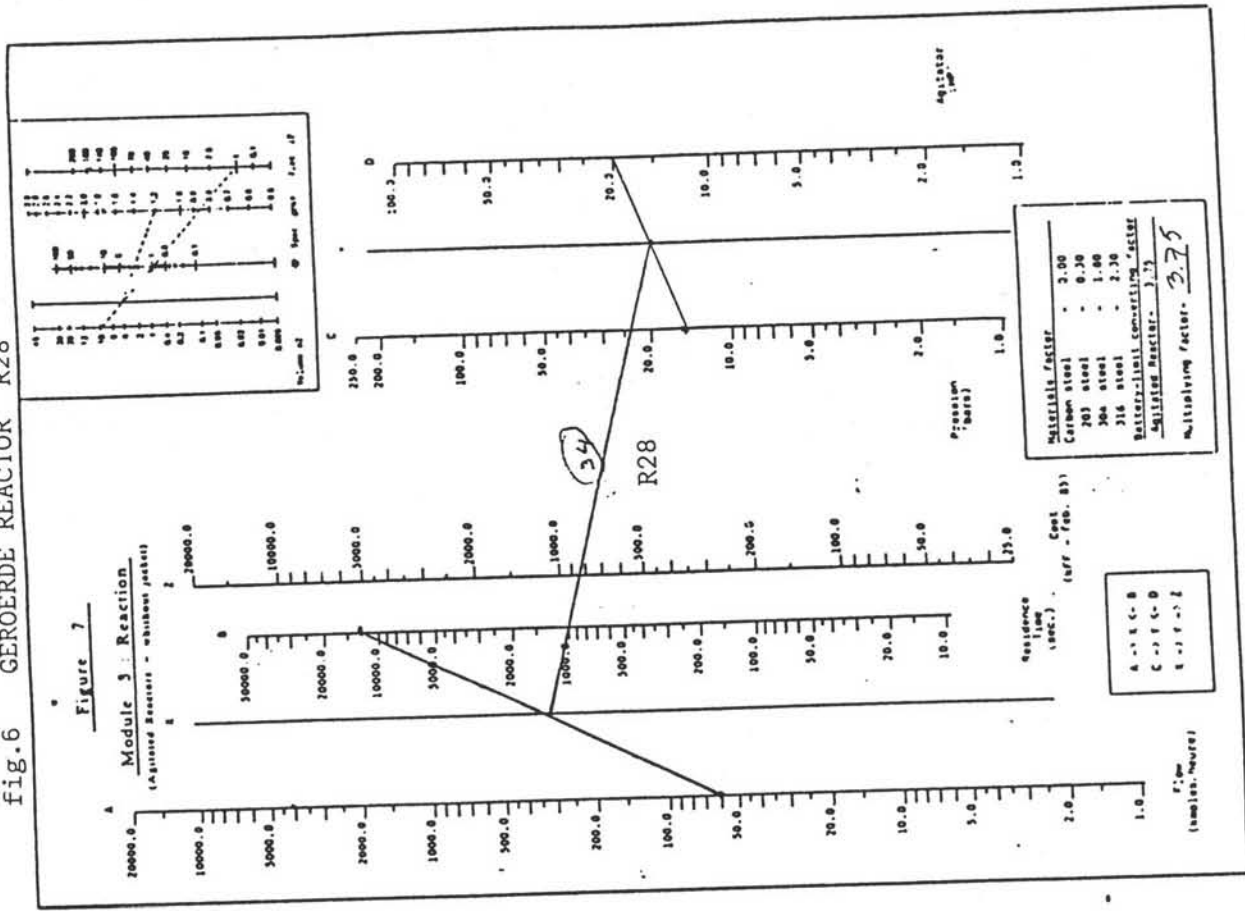
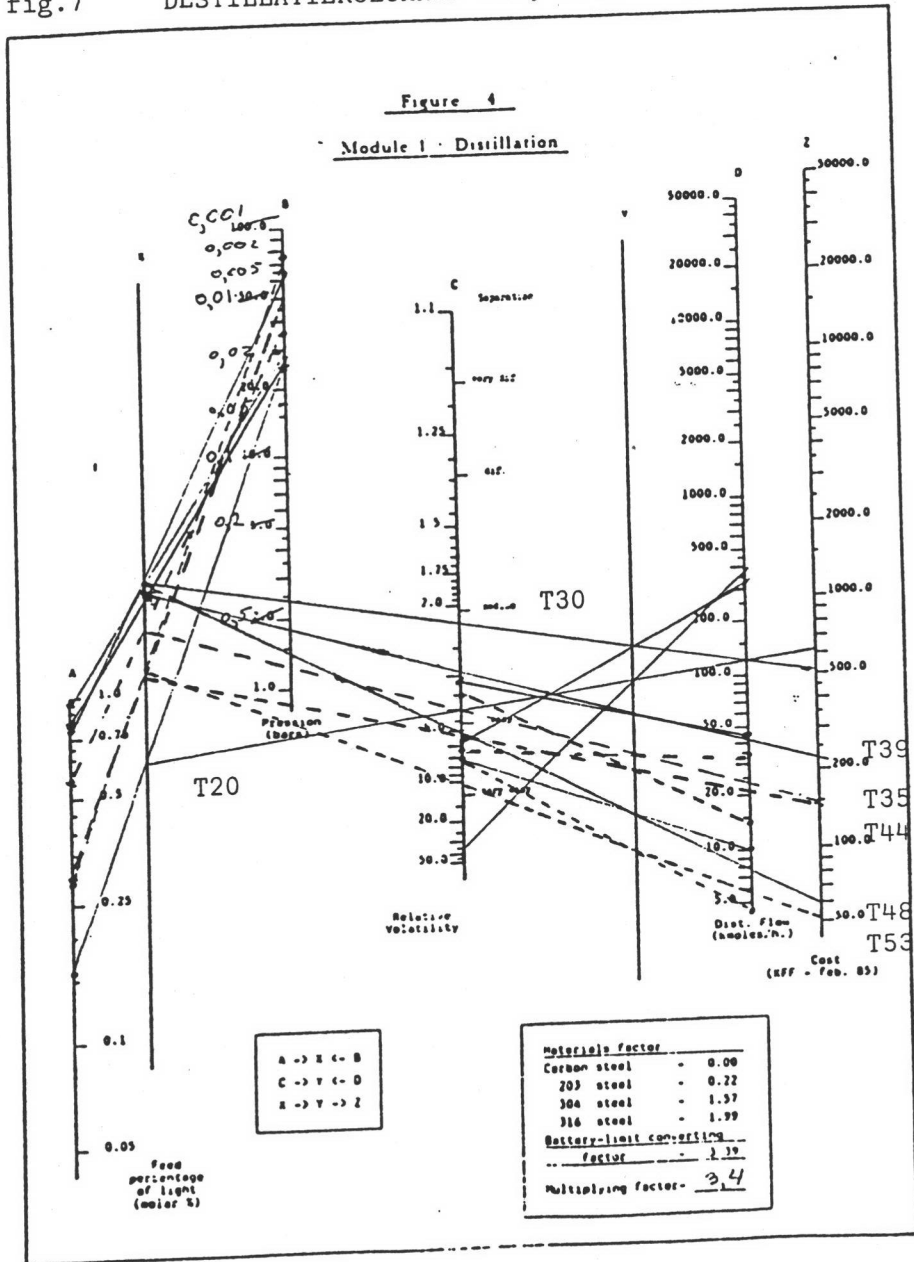


fig.7 DESTILLATIEKOLOMMEN T20, T30, T35, T39, T44, T48, T53.



246-8

Appendix AQ

GEVOELIGHEIDS ANALYSE.

AQ.1 Componenten die in de kostenbepaling een rol spelen.

Er zijn twee soorten componenten. Die in geld uitgedrukt kunnen worden:

1. Investering	fl 21.000.000,-
2. Restwaarde nihil	
3. Vaste exploitatie kosten	fl 17.800.000,-
4. Variabele exploitatie kosten	variabel met prijs
5. Werk kapitaal	fl 22.000.000,-
6. Grondstof prijs en prijsstijging	EO 827,00 fl/ton H2O 6,80 fl/ton
7. Energie prijs en prijsstijging	MPst 17,30 fl/ton
8. Product prijs en prijsstijging	MEG 1138,00 fl/ton DEG 777,00 fl/ton TEG 1648,00 fl/ton HEG 760,00 fl/ton
9. Rente percentage	12 %

en die met de tijd op de kosten inwerken:

10. Bouwtijd	2 jaar
11. Capaciteit	150 MEG/ 10 DEG/ 9,8 TEG/ 2,8 HEG
12. Levensduur	10 jaar
13. Aanloop pad (productie verhoging tot vollast)	3 jaar

Punt 1 Dit getal is ons gegeven door de groep die de investering op verschillende manieren heeft uitgerekend. Het resultaat is dat er fl 21.000.000 nodig zijn om de fabriek te bouwen.

De restwaarde wordt door Prof. Montfoort gesteld op nihil.

Punt 3 wordt berekend met de methode aan gegeven in Kirk-Othmer:

Vaste exploitatie kosten:		
Arbeid	3 operators per ploeg	1.500.000
	1 supervisor per ploeg	
	2 overall supervisors	
Onderhoud	3 % van de investering	600.000
Plant Overhead	4,5 % van de investering	900.000
Afschrijving	10 % van de investering	2.000.000
		+
		<u>5.000.000</u>
Overige kosten:		
Company overhead	5 % van verkoop	9.000.000
Verzekering	1 % van de investering	200.000
transport	2 % van verkoop	3.600.000
		+
		<u>12.800.000</u>
Totaal vaste exploitatie kosten-----		17.800.000

tabel AQ.1: Variabele exploitatie kosten voor jaren 1 t/m 12.

jaar	verkoop	inkoop	energie	totaal	cash flow	werkkap.
1	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,00
2	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,00
3	77,13	43,53	1,39	44,92	22,30	8,97
4	133,60	77,70	2,49	80,19	40,04	14,61
5	188,90	113,20	3,62	116,80	54,34	26,13
6	187,10	115,40	3,69	119,10	50,12	24,94
7	185,20	117,70	3,77	121,50	45,86	23,74
8	183,30	120,10	3,85	124,00	41,58	22,52
9	181,50	122,50	3,92	126,40	37,26	21,30
10	179,70	125,00	4,00	129,00	32,92	20,10
11	177,90	127,50	4,08	131,50	28,54	18,86
12	176,10	130,00	4,16	134,20	24,13	17,63

↑ = verk. - var. kosten -
binnen markt

De bedragen staan in miljoenen guldens uitgedrukt. De bovenstaande in de tabel weergegeven bedragen worden gehanteerd als standaard voor de gevoeligheids analyse.

Bij de standaard horen de volgende randvoorwaarden:

productie pad:	jaar 1	0 % van productie last
	jaar 2	0 % van productie last
	jaar 3	40 % van productie last
	jaar 4	70 % van productie last
	jaar 5	t/m 12 vollast.
Daling product prijs		1 % per jaar.
Stijging grondstof prijs		2 % per jaar.
Bouwtijd		2 jaar.
Levensduur		10 jaar.
Rente		12 %
Werkkapitaal		f1 22.000.000,-.
Investing		f1 21.000.000,-.

In punt 5 wordt het werkkapitaal berekend volgens Kirk-Othmer. Het werkkapitaal wordt gegeven door de korte termijn bezittingen, die snel omgezet kunnen worden naar cash. Het bestaat uit :

1. Liquide middelen.
2. Voorraden.
3. Korte termijn debiteuren.
4. Korte termijn crediteuren.

Er wordt een schatting gemaakt van het werkkapitaal op basis van :

1. 4-6 % van de verkoop.
2. 1 maand grondstofverbruik.
halffabricaten 2 % van de productiekosten.
1 maand plantproductiekosten.
3. 30-45 dagen van de netto product verkoopwaarde.
4. 30 dagen van het grondstoffenverbruik.

In tabel AQ.1 is voor elk jaar het werkkapitaal opgenomen.

Punt 6. De grondstof- en productprijzen (punt 8) en stijgingen daarvan staan reeds vermeld in de bovenstaande opsomming. Punt 7. Hetzelfde geldt voor de energieprijzen. De rente in punt 9 is ontleend aan de syllabus Investeren van college z-11. De punten 10 t/m 13 staan vermeld in de opsomming.

AQ.2 De Netto Contante Waarde (NCW).

De cashflow is de netto ontvangst die gelijk is aan het verschil van de ontvangst uit hoofde van de producten die uit het project zijn voortgekomen, en de uitgaven die zijn gedaan voor de complementaire productiemiddelen, zoals arbeid, energie, grond- en hulpstoffen.

Voor de NCW worden de jaarlijkse cash flows en de restwaarde verdisconteerd naar het moment van de investering. Het verschil tussen de contante waarde van de toekomstige opbrengsten en de investering is de netto contante waarde van het project.

De NCW wordt bepaald met:

Voor de restwaarde R, die nihil werd gesteld, hebben we het werkkapitaal ingevuld. Immers, aan het einde van het project wordt het in cash omgezet.

A0.3 Gevoeligheids Analyse.

Voor de gevoeligheids analyse zijn een aantal factoren in ogenschouw genomen die relevant zouden kunnen zijn voor een afwijking in de van tevoren gestelde verwachting. Deze factoren zijn bouwtijd, energieprijsstijging, grondstof prijsstijging, werkkapitaal, investering, productprijzdaling en het rentepercentage. De standaard randvoorwaarden zijn, een voor een, aangepast om een duidelijk beeld te krijgen van de invloed van de verschillende factoren. De aanpassing heeft zowel naar beneden als naar boven plaats gevonden en is vervolgens uitgezet in figuur . .

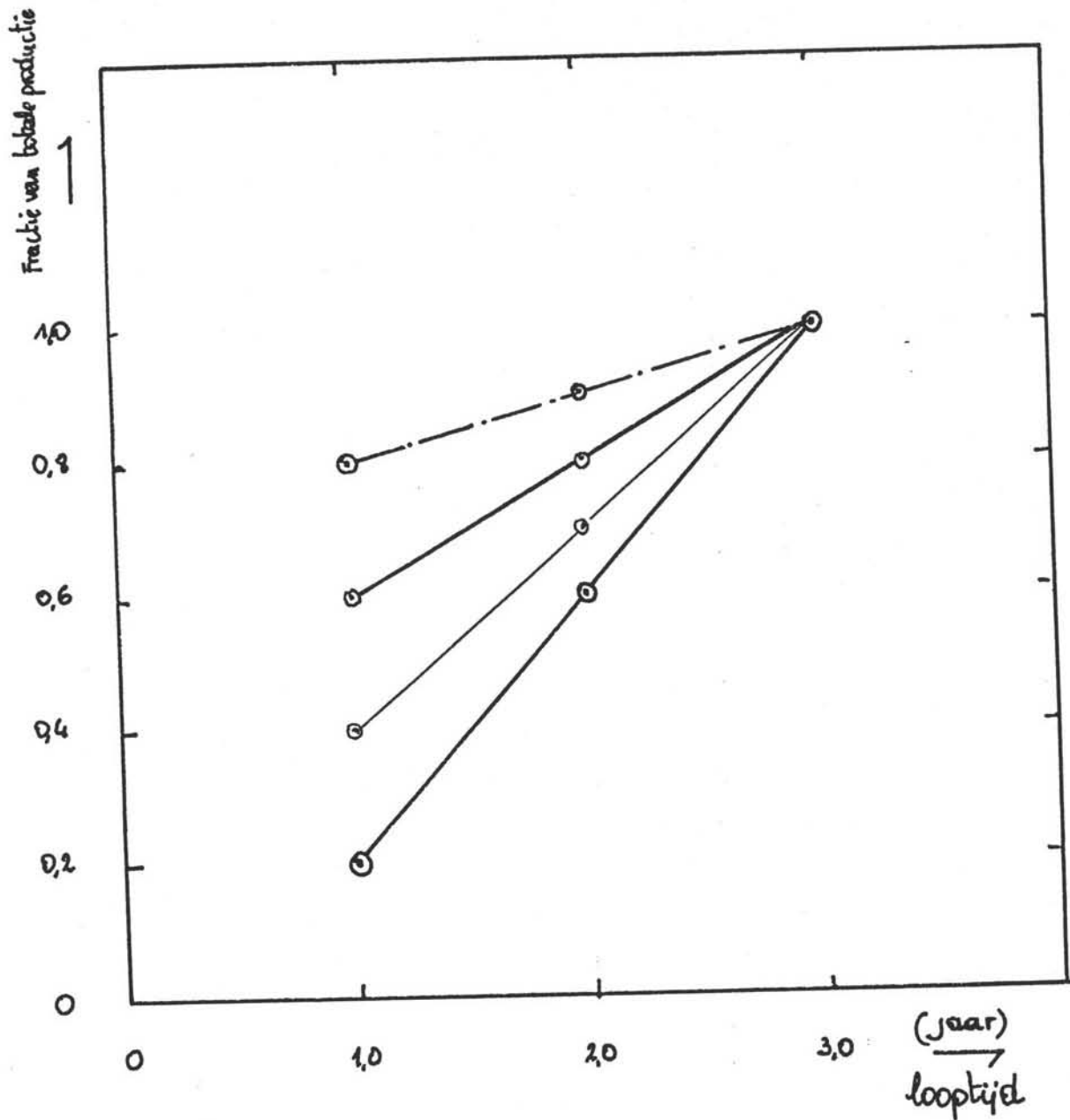
Uit de figuur blijkt dat de factoren die de grootste verandering veroorzaken in de NCW zijn in volgorde van belangrijkheid :

1. Het rentepercentage.
2. De bouwtijd.
3. De grondstofprijsstijging.
4. De productprijzdaling.

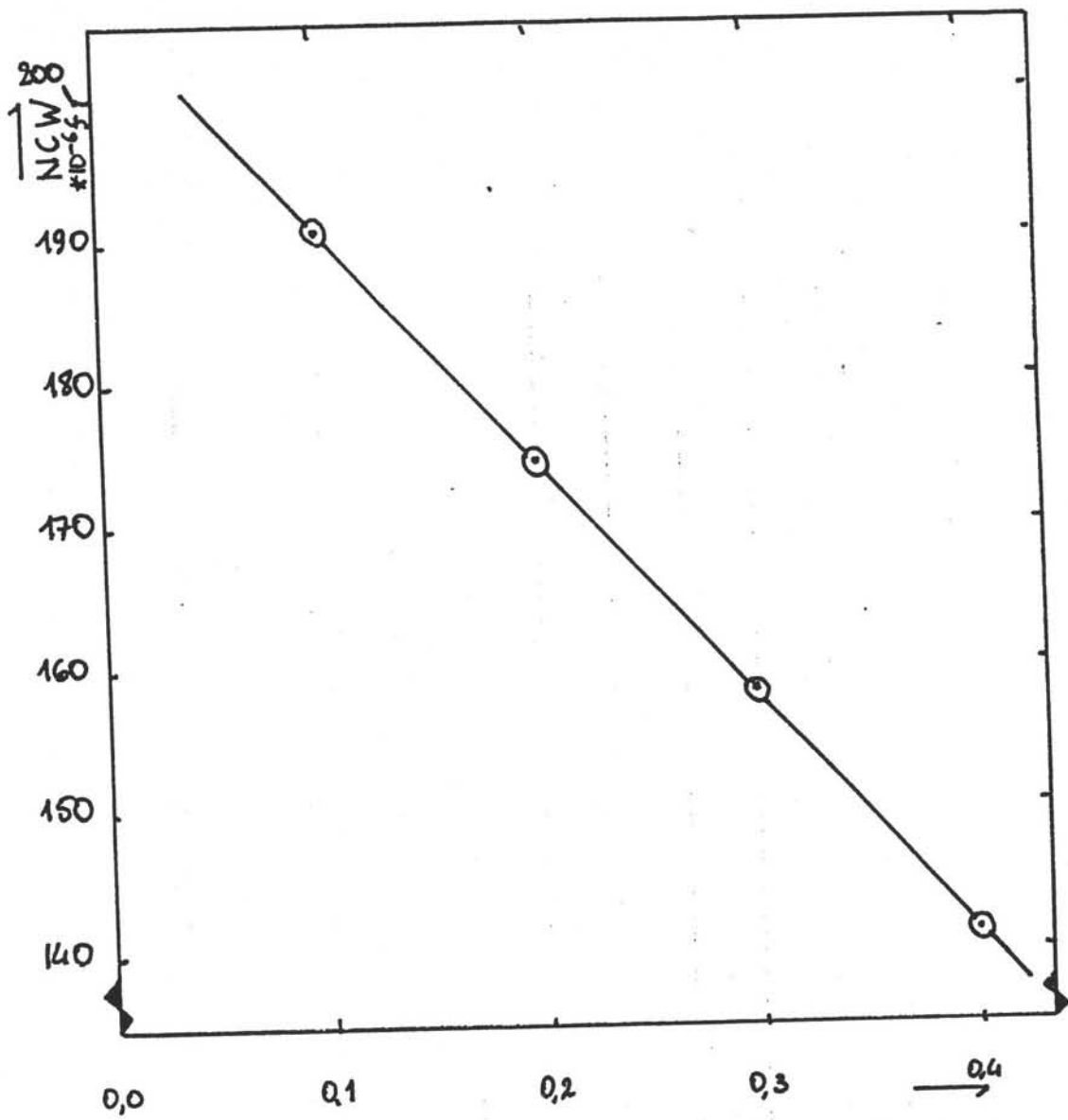
De factoren die weinig of geen invloed hebben op de NCW zijn:

1. De hoogte van de investering.
2. De energieprijsstijging.
3. De grootte van het werkkapitaal.

Om een beeld te krijgen van het effect van het productie aanlooppad op de NCW bezien we de figuren. Men kan hier uit opmaken dat hoe hoger de beginwaarde van de belasting van de fabriek, hoe gunstiger de NCW wordt.



Figuur : Een beeld van vier verschillende te volgen routes om tot 100% productie te komen in een tijdsperiode van drie jaar.



helling in figuur 1.

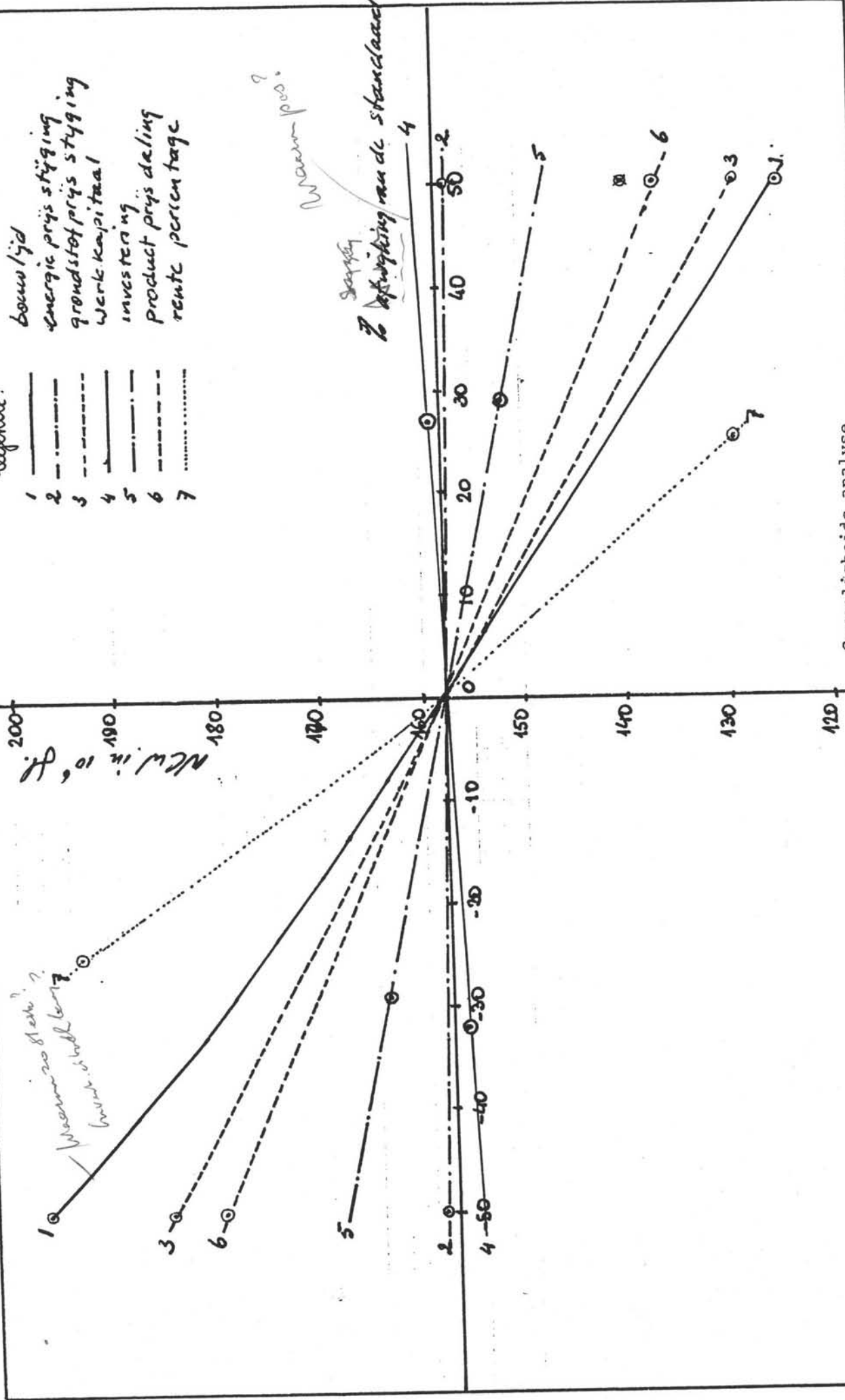
Figuur 2: De NCW als functie van de stijging van de productie over een tijdsperiode van drie jaar.

legende:

- 1 —————
- 2 - - - - -
- 3 - - - - -
- 4 —————
- 5 - - - - -
- 6 - - - - -
- 7 ········

- boonlijd
- energie prijs stijging
- grondstof prijs stijging
- werk.kapitaal
- investering
- product prijs daling
- rente percentage

NWL in 10⁶ fl.



Gevoeligheids analyse

LITERATUURLIJST.

1. Billet, R.; Verdampfung und ihre technischen Anwendungen. Verlag Chemie GmbH, Weinheim 1981.
1. Coulson & Richardson; Chemical Engineering Vol 3. Pergamon Press, Oxford 1971.
2. Foust, A.S.; Principles of Unit Operations. J. Wiley & Sons inc., New York 1960.
4. Gallant, R.W.; Physical Properties of Hydrocarbons. Gulf Pub. co., Houston 1968.
3. Gmehling, G. & Onken, U.;
6. Graauw, J. & Jong, E.J. de; College dictaat Apparaten voor de Proces Industrie II. T.U.D., Delft. Vapor-liquid equilibrium data collection. Verlag & Druckerei F. Bischoff, Frankfurt 1977.
4. Gregory, R.A., Sweed, N.H.; Parametric Pumping: behaviour of open systems. The Chemical Engineering Journal, Vol. 1 1970.
8. Grevillot, G. & Dodds, J.; Separation by Parapumping in Adsorption Systems: a new approach. I. Chem. Eng. Symposium series # 54.
9. Hengstebeck, R.J.; Distillation. Principles and design procedures. Reinhold pub. corp., New York 1961.
10. Hoek, W., Gandasasmith, I.; Verslag behorende bij het fabrieksvoorontwerp. Voorstudie: Glycolen productie Shell Moerdijk.
11. Jong, Prof. E.J. de; College dictaat Apparatenbouw voor de Proces Industrie. THD API, Delft 1980.
5. Jong, Prof. E.J. de; College dictaat Ontwl IIc: Apparaten voor de Proces Industrie. THD, Delft 1982.8
13. Jong, W.A. de & Berg, P.L. v/d; College dictaat Chemische Reactorkunde M32. T.U.D., Delft
6. Keenan, J.H.; Thermodynamic properties of water including vapor, liquid and solid phases.

15. Kern, D.Q.; Process Heat Transfer. McGraw-Hill book co. Inc., New York 1950.
16. Kirk-Othmer; Encyclopedia of Chemical Technology, 3rd ed. J. Wiley & sons inc., New York.
7. Klaren, D.G.; Development of a Vertical Flash Evaporator. THD, Delft 1975.
18. Loos, Th.W.. de, Kooi, H.J. van der; College dictaat Toegepaste Thermodynamica en Fasenleer. THD, Delft.
8. Mantell, C.C.; Adsorption. McGraw-Hill book co. inc., New York 1951.
9. Meares, P.; Membrane Separation Processes. Elsevier Scientific Pub. co., Amsterdam 1976.
10. Miner, D.F. & Seastone, J.B.; Handbook of Engineering Materials. J. Wiley & sons inc., New York 1955.
22. Montfoort, Prof. ir. A.G.; College dictaat de Chemische Fabriek St 44. afd. S.T., T.U.D., Delft feb 1986.
23. Perry, R.H.; Chemical Engineer's Handbook 6th ed. McGraw-Hill book co., 1984.
11. Reid & Sherwood; Properties of Gases and Liquids. Chem. Eng. Series, McGraw-Hill Inc., New York 1958.
25. Rietema, K.; Fysische Transport en Overdrachts Verschijnselen. Het Spectrum, Utrecht 1976.
26. Schmidt, E.; Properties of Water and Steam. Springer Verlag, Berlin 1969.
27. Schweitzer, P.A.; Handbook of Separation Techniques for Chemical Engineers. McGraw-Hill book co., New York 1979.
12. Shaw, D.J.; Introduction to Colloid and Surface Chemistry. Butterworth & co. Ltd., 1980.
29. Simulation Sciences; Process, steady state heat and mass balance flowsheet simulator. Sim Sci. Revision 3 sept. 1983. Manual.
13. Sourirajan, S.; Reverse Osmosis. Logos Press Ltd with Elek Books Ltd., Ottawa 1971.
31. Sourirajan, S.; Reverse osmosis and synthetic membranes, theory, technology, engineering. National Research Council Canada, Ottawa 1977.

14. Spiegler, K.S.; Principles of Desalination. Academic Press, New York 1966
33. Stichlmair, J.; Dimensionering des Bodenkolommes I, II, III. Chem. Ing. Tech. 50 (1978); #4: 281-284, #5: 383-387, #6: 453-456.
34. Sulzer; Mixing Process Equipment. Sulzer Nederland bv, Den Haag.
35. Sulzer; Separation columns for distillation and absorption. Sulzer Nederland bv, Den Haag.
15. Sweed, N.H., Wilhelm, R.H.; Parametric Pumping. I. & E.C. Fundamentals, Vol 8, 1969.
16. Timmermans, J.; Physico-chemical constants of pure organic compounds. Elseviers Publ. co., New York 1950.
17. Unger, K.K.; Porous Silica. Elseviers Sc. Publ. co., Amsterdam 1979.
18. Vogel, A.I.; Practical Organic Chemistry. Green & co. Ltd., London 1961.
40. Wesselingh, J.A.; Separation processes on your pocket computer. D.U.M., Delft 1982.
19. Wheast, R.C.; Handbook of Chemistry and Physics 48th ed. The Chem. Rubber co. Cleveland.
20. Wong, J.K.S.; An Experimental Method for Spray Evaporation. National Research Council Canada, Ottawa 1973.
43. Zuiderweg, Prof. F.J.; College dictaat Fysische Scheidings Methoden. THD API, Delft 1980.
21. Zuideveld, P.L., Kok, R.J.; Fysische Scheidingsmethoden. DUM bv, Delft 1973.
22. Symposium on: Alternatives to Distillation. I. Chem. Eng. Symposium series # 54, 1978.
46. Gas Processing Handbook: High concentration glycol dehydration. Hydrocarbon Processing April 1984.
23. VDI-Warme Atlas. Verlag des Vereins Deutscher Ingenieure, Dusseldorf 1977.

Colloquium Shell Maardyk 27/5/87

- 8.30 Vertrek bij API, Delft
- 9.30 Aankomst bij Shell Maardyk
- 9.30 - 10.15 Koffie + dia's over Shell Maardyk.
- 10.15 Inleiding, processchema E.J. Verhoef.
- 10.30 Groep 1 ^{one H₂O minimum. bus: schot! Berekend bus kanten} reactorsectie, 1 en 2 R.M.v. Bekkum
^{MEG reactor} reactor systeem, heterog. katalyse F.J.E. Veldhuizen
- 11.15 Koffie pauze
- 11.30 Groep 2 ^{one H₂O minimum. bus: schot! Berekend bus kanten} waterafscheiding A.A. Schulte
alternatieve methodes E.J. Verhoef
verdampers P.V.F. Andriegg
dist. kolom
- 12.30 Groep 3 glykolen destillatie A.N. Klug / K.F. Stoker
pakkingen / schotels C.F. Stoker
- 13.15 - 14.30 Lunchpauze, incl. aperitief.
- 14.30 - Groep 3 2^e reactor C. Blom
- 15.00 Thee pauze
- 15.15 Kap. kosten, prod. kosten, econ. evaluatie R.T. Blomma,
M. Grimmon, J.M. Keestjens
- 15.30 Conclusies, 1 en 2 reactor systeem J. de Wolff,
heterogene katalyse P. Rovers
pakkingen - schotels
- 16.00 Sluiting.