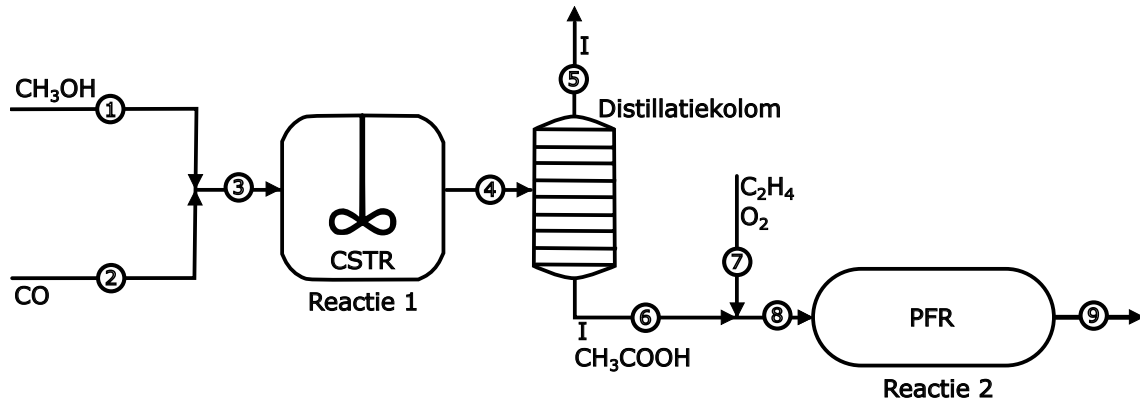
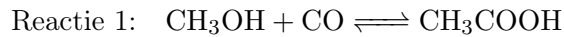


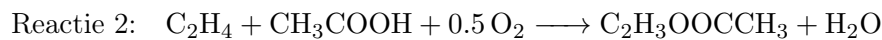
Azijnzuur en vinyl acetaat monomeer (VAM) productie



Het Monsanto-proces wordt gebruikt voor de omzetting van methanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) en koolstofmonoxide ( $\text{CO}$ ) naar azijnzuur ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ). De reactie (reactie 1) vindt plaats in vloeistoffase in een CSTR. Na de reactie kan het product azijnzuur ( $\text{CH}_3\text{COOH}$ ) gescheiden worden van de overblijvende reagentia in een distillatiekolom. De overblijvende reagentia kunnen verder in het proces als inerte stoffen (I) worden beschouwd. De bodemstroom van de kolom bevat het product azijnzuur. Azijnzuur kan vervolgens gebruikt worden om, samen met ethyleen ( $\text{C}_2\text{H}_4$ ) en zuurstofgas ( $\text{O}_2$ ), vinyl acetaat monomeer ( $\text{C}_2\text{H}_3\text{OOCCH}_3$ ) te produceren. De reactie (reactie 2) vindt plaats in gasfase in een PFR. Alle reactoren mogen isotherm verondersteld worden. Noteer steeds alle assumpties die gemaakt worden.



met  $R_{\text{CH}_3\text{OH}} = -k_1 [\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{h}]$



met  $R_{\text{CH}_3\text{COOH}} = -k_2 C_{\text{CH}_3\text{COOH}} [\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{h}]$

**Vraag 1 Bepaal het benodigde volume voor de CSTR**, indien de voedingstromen 1 en 2 bestaan uit, respectievelijk, zuiver methanol en zuiver koolstofmonoxide. Gebruik hiervoor de gegevens uit Tabel 1.

Parameter	Symbool	Waarde
Volumetrisch debiet stroom 1	$q_1$	$3 \text{ m}^3/\text{h}$
Concentratie $\text{CH}_3\text{OH}$ stroom 1	$C_{\text{CH}_3\text{OH},1}$	$4.5 \text{ mol}/\text{m}^3$
Volumetrisch debiet stroom 2	$q_2$	$6 \text{ m}^3/\text{h}$
Concentratie $\text{CO}$ stroom 2	$C_{\text{CO},2}$	$1.5 \text{ mol}/\text{m}^3$
Conversie $\text{CO}$ in CSTR	$X_{\text{CO}}$	0.9
Kinetische constante reactie 1	$k_1$	$0.1 \text{ mol}/(\text{m}^3 \cdot \text{h})$

Tabel 1: Gegevens met betrekking tot de CSTR.

Massabalans over het mengpunt:

$$q_1 * C_{\text{CH}_3\text{OH},1} - (q_1 + q_2) * C_{\text{CH}_3\text{OH},3} = 0$$
$$C_{\text{CH}_3\text{OH},3} = 1.5 \text{ mol/m}^3$$

$$q_2 * C_{\text{CO},2} - (q_1 + q_2) * C_{\text{CO},3} = 0$$
$$C_{\text{CO},3} = 1.0 \text{ mol/m}^3$$

Massabalans over CSTR

$$F_{\text{CH}_3\text{OH},3} - F_{\text{CH}_3\text{OH},4} + R_{\text{CH}_3\text{OH}}(C_{\text{CH}_3\text{OH},4}) * V = 0$$
$$(q_1 + q_2) * C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - (q_1 + q_2) * C_{\text{CH}_3\text{OH},4} = k_1 * V$$
$$(q_1 + q_2) * (C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - C_{\text{CH}_3\text{OH},4}) = k_1 * V$$
$$(q_1 + q_2) * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4}) = k_1 * V$$
$$(q_1 + q_2) * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},3} * (1 - x_{\text{CO}})) = k_1 * V$$
$$V = 81 \text{ m}^3$$

**Vraag 2** Veronderstel dat al het azijnzuur aanwezig in de inputstroom van de distillatiekolom (stroom 4) uiteindelijk terecht komt in de bodemstroom van de distillatiekolom (stroom 6). Verder is er geweten dat de bodemstroom uit 90 mol% azijnzuur en 10 mol% inerten bestaat. **Bereken het molaire debiet van azijnzuur en het molaire debiet van inerten in de bodemstroom van de distillatiekolom.**

Massabalans  $\text{CH}_3\text{COOH}$  over de distillatiekolom:

$$(q_1 + q_2) * C_{\text{CH}_3\text{COOH},4} - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = 0$$
$$(q_1 + q_2) * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4}) - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = 0$$
$$(q_1 + q_2) * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},3} * (1 - x_{\text{CO}})) - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = 0$$
$$F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = 8.1 \text{ mol/h}$$

$$F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = x_{\text{CH}_3\text{COOH},6} * F_{\text{tot},6}$$
$$F_{\text{tot},6} = \frac{F_{\text{CH}_3\text{COOH},6}}{x_{\text{CH}_3\text{COOH},6}}$$
$$F_{\text{tot},6} = 9 \text{ mol/h}$$

$$F_{\text{I},6} = x_{\text{I},6} * F_{\text{tot},6}$$
$$F_{\text{I},6} = 0.9 \text{ mol/h}$$

**Vraag 3** De bodemstroom van de distillatiekolom (stroom 6) wordt samengevoegd met een voedingsstroom bestaande uit  $C_2H_4$  en  $O_2$  (stroom 7). De resulterende stroom (stroom 8) wordt gebruikt als inlaatstroom voor de PFR. **Bepaal het benodigde volume voor de PFR.** Gebruik hiervoor de bijkomende gegevens uit Tabel 2. Indien je vraag 2 niet hebt kunnen oplossen, mag je verder werken met  $F_{CH_3COOH,6} = 8.1 \text{ mol/h}$  en  $F_{I,6} = 0.9 \text{ mol/h}$ .

Parameter	Symbool	Waarde
Molair debiet $O_2$ stroom 7	$F_{O_2,7}$	$10 \text{ mol/h}$
Molair debiet $C_2H_4$ stroom 7	$F_{C_2H_4,7}$	$10 \text{ mol/h}$
Conversie $CH_3COOH$ in PFR	$X_{CH_3COOH}$	0.9
Druk stroom 8	$P_8$	$1 \text{ atm}$
Temperatuur stroom 8	$T_8$	$400 \text{ K}$
Gasconstante	$R$	$0.0821 \text{ (m}^3 \cdot \text{atm)/(K} \cdot \text{kmol)}$
Kinetische constante reactie 2	$k_2$	$0.1 \text{ h}^{-1}$

Tabel 2: Gegevens met betrekking tot de PFR.

Massabalans  $CH_3COOH$  over de PFR:

$$\begin{aligned}
 F_{CH_3COOH} - (F_{CH_3COOH} + dF_{CH_3COOH}) + R_{CH_3COOH} * dV &= 0 \\
 dF_{CH_3COOH} &= R_{CH_3COOH} * dV \\
 -F_{CH_3COOH,8} * dx_{CH_3COOH} &= -k_2 * C_{CH_3COOH} * dV \\
 -F_{CH_3COOH,8} * dx_{CH_3COOH} &= -k_2 * C_{CH_3COOH,8} * \frac{1-x_{CH_3COOH}}{1+\epsilon*x_{CH_3COOH}} * dV
 \end{aligned}$$

Massabalans integreren:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{x_{CH_3COOH}} \frac{1+\epsilon*x_{CH_3COOH}}{1-x_{CH_3COOH}} * dx_{CH_3COOH} &= \int_0^V \frac{k_2*C_{CH_3COOH,8}}{F_{CH_3COOH,8}} * dV \\
 \int_0^{x_{CH_3COOH}} \frac{1}{1-x_{CH_3COOH}} dx_{CH_3COOH} + \int_0^{x_{CH_3COOH}} \frac{\epsilon*x_{CH_3COOH}}{1-x_{CH_3COOH}} dx_{CH_3COOH} &= \int_0^V \frac{k_2*C_{CH_3COOH,8}}{F_{CH_3COOH,8}} dV \\
 \int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u} * -du + \epsilon * \int_{u_1}^{u_2} \frac{1-u}{u} * -du &= \frac{k_2*C_{CH_3COOH,8}}{F_{CH_3COOH,8}} \int_0^V dV \text{ met substitutie } u = 1 - x_{CH_3COOH} \\
 -[ln(u)]_{u_1}^{u_2} - \epsilon [ln(u) - u]_{u_1}^{u_2} &= \frac{k_2*C_{CH_3COOH,8}}{F_{CH_3COOH,8}} V \\
 [ln(1-x_{CH_3COOH})]_{x_{CH_3COOH}}^0 + \epsilon [ln(1-x_{CH_3COOH}) - (1-x_{CH_3COOH})]_{x_{CH_3COOH}}^0 &= \frac{k_2*C_{CH_3COOH,8}}{F_{CH_3COOH,8}} V \\
 V &= \frac{F_{CH_3COOH,8}}{k_2*C_{CH_3COOH,8}} * ((1 + \epsilon) * ln(\frac{1}{1-x_{CH_3COOH}}) - \epsilon * x_{CH_3COOH})
 \end{aligned}$$

Expansiefactor:

$$\epsilon = \frac{V_{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}=1} - V_{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}=0}}{V_{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}=0}}$$

$$\epsilon = \frac{(0.9+8.1+8.1+5.95+1.9)-(0.9+8.1+10+10)}{(0.9+8.1+10+10)} = -0.14$$

Initiële concentratie:

$$C_{\text{CH}_3\text{COOH},8} = \frac{y_{\text{CH}_3\text{COOH},8} P_8}{R T_8} = \frac{0.279 * 1 \text{ atm}}{0.08205 \frac{\text{m}^3 * \text{atm}}{\text{K} * \text{kmol}} * 400 \text{ K}} = 8.5 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Volume uitwerken:

$$V = \frac{8.1 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{0.1 \frac{1}{\text{h}} * 8.5 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} \left( (1 - 0.14) * \ln\left(\frac{1}{1-0.9}\right) + 0.14 * 0.9 \right) = 20.07 \text{ m}^3$$