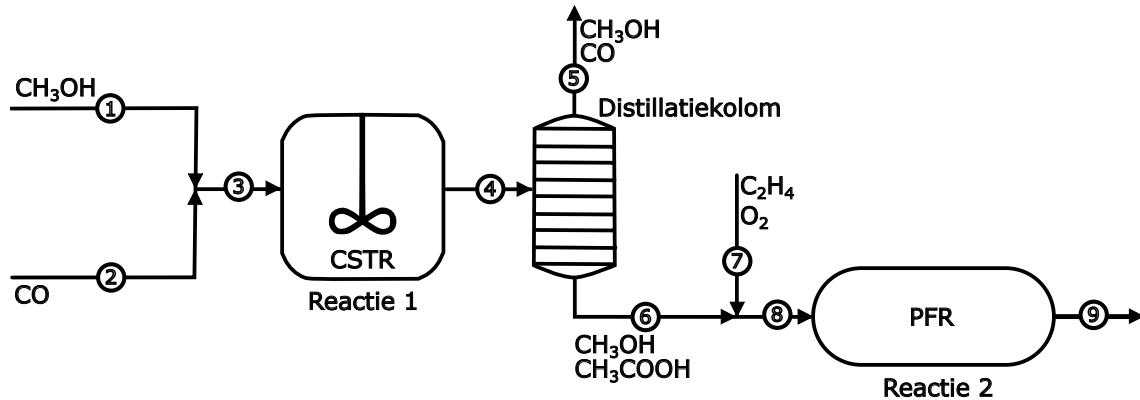
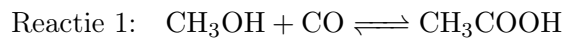


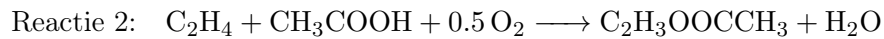
Azijnzuur en vinyl acetaat monomeer (VAM) productie



Het Monsanto-proces wordt gebruikt voor de omzetting van methanol (CH_3OH) en koolstofmonoxide (CO) naar azijnzuur (CH_3COOH). De reactie (reactie 1) vindt plaats in vloeistoffase in een CSTR. Na de reactie kan het product azijnzuur (CH_3COOH) 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 (C_2H_4) en zuurstofgas (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 $R_{\text{CH}_3\text{OH}} = -k_1 \quad [\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{h}]$



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

Vraag 1 Bepaal het benodigde volume voor de CSTR. Gebruik hiervoor de gegevens uit Tabel 1.

Parameter	Symbool	Waarde
Volumetrisch debiet stroom 3	q_3	$9 \text{ m}^3/\text{h}$
Concentratie CH_3OH stroom 3	$C_{\text{CH}_3\text{OH},3}$	$1.5 \text{ mol}/\text{m}^3$
Concentratie CO stroom 3	$C_{\text{CO},3}$	$1.0 \text{ mol}/\text{m}^3$
Conversie CO in CSTR	X_{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 CSTR:

$$\begin{aligned}F_{\text{CH}_3\text{OH},3} - F_{\text{CH}_3\text{OH},4} + R_{\text{CH}_3\text{OH}}(C_{\text{CH}_3\text{OH},4}) * V &= 0 \\q_3 * C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - q_3 * C_{\text{CH}_3\text{OH},4} &= k_1 * V \\q_3 * (C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - C_{\text{CH}_3\text{OH},4}) &= k_1 * V \\q_3 * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4}) &= k_1 * V \\q_3 * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},3} * (1 - x_{\text{CO}})) &= k_1 * V \\V &= 81\text{m}^3\end{aligned}$$

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 80 mol% azijnzuur en 20 mol% methanol bestaat. **Bereken het molaire debiet van azijnzuur en het molaire debiet van methanol in de bodemstroom van de distillatiekolom (stroom 6). Bereken ook het molaire debiet van methanol en het molaire debiet van koolstofmonoxide in de topstroom van de distillatiekolom (stroom 5).**

Massabalans CH_3COOH over de distillatiekolom:

$$\begin{aligned}q_3 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},4} - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} &= 0 \\q_3 * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4}) - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} &= 0 \\q_3 * (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},3} * (1 - x_{\text{CO}})) - F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} &= 0 \\F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} &= 8.1 \text{ mol/h}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} &= x_{\text{CH}_3\text{COOH},6} * F_{\text{tot},6} \\F_{\text{tot},6} &= \frac{F_{\text{CH}_3\text{COOH},6}}{x_{\text{CH}_3\text{COOH},6}} \\F_{\text{tot},6} &= 10.125 \text{ mol/h}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}F_{\text{CH}_3\text{OH},6} &= x_{\text{CH}_3\text{OH},6} * F_{\text{tot},6} \\F_{\text{CH}_3\text{OH},6} &= 2.025 \text{ mol/h}\end{aligned}$$

Massabalans CH_3OH over de distillatiekolom:

$$\begin{aligned}q_3 * C_{\text{CH}_3\text{OH},4} - F_{\text{CH}_3\text{OH},5} - F_{\text{CH}_3\text{OH},6} &= 0 \\q_3 * (C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4})) - F_{\text{CH}_3\text{OH},5} - F_{\text{CH}_3\text{OH},6} &= 0 \\F_{\text{CH}_3\text{OH},5} &= q_3 * (C_{\text{CH}_3\text{OH},3} - (C_{\text{CO},3} - C_{\text{CO},4})) - F_{\text{CH}_3\text{OH},6} \\F_{\text{CH}_3\text{OH},5} &= 3.375 \text{ mol/h}\end{aligned}$$

Massabalans CO over de distillatiekolom:

$$\begin{aligned}q_3 * C_{\text{CO},4} - F_{\text{CO},5} &= 0 \\q_3 * C_{\text{CO},3} * (1 - x_{\text{CO}}) - F_{\text{CO},5} &= 0 \\F_{\text{CO},5} &= 0.9 \text{ mol/h}\end{aligned}$$

Vraag 3 Zouden we het geproduceerde molaire debiet van azijnzuur kunnen verhogen door de topstroom van de distillatiekolom (stroom 5) te recyclen en bij te voegen aan de inputstroom van de CSTR, zonder het volume van de CSTR te wijzigen? **Beargumenteer.**

Nee, omwille van zero-order kinetiek. Een hoger molair debiet van de reagentia zal niet leiden tot een verhoging van de reactiesnelheid. Enkel een groter volume van de CSTR zou leiden tot een hogere productie van azijnzuur.

We kunnen dit ook aantonen aan de hand van de massabalans:

Massabalans CH_3OH over CSTR:

$$F_{\text{CH}_3\text{OH},3} + F_{\text{CH}_3\text{OH},5} - F_{\text{CH}_3\text{OH},4} + R_{\text{CH}_3\text{OH}}(C_{\text{CH}_3\text{OH},4}) * V = 0$$

$$F_{\text{CH}_3\text{OH},4} = 9.9 \text{ mol/h}$$

$$-\Delta F_{\text{CH}_3\text{OH}} = \Delta F_{\text{CH}_3\text{COOH}} = -(F_{\text{CH}_3\text{OH},4} - (F_{\text{CH}_3\text{OH},3} + F_{\text{CH}_3\text{OH},5}))$$

$$\Delta F_{\text{CH}_3\text{COOH}} = 8.1 \text{ mol/h}$$

Vraag 4 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 $F_{\text{CH}_3\text{COOH},6} = 8.1 \text{ mol/h}$ en $F_{\text{I},6} = 0.9 \text{ mol/h}$.

Parameter	Symbool	Waarde
Molair debiet O_2 stroom 7	$F_{\text{O}_2,7}$	10 mol/h
Molair debiet C_2H_4 stroom 7	$F_{\text{C}_2\text{H}_4,7}$	10 mol/h
Conversie CH_3COOH in PFR	$X_{\text{CH}_3\text{COOH}}$	0.9
Druk stroom 8	P_8	1 atm
Temperatuur stroom 8	T_8	400 K
Gasconstante	R	$0.0821 \text{ (m}^3 \cdot \text{atm)/(K.kmol)}$
Kinetische constante reactie 2	k_2	0.1 h^{-1}

Tabel 2: Gegevens met betrekking tot de PFR.

Massabalans CH_3COOH over de PFR:

$$F_{\text{CH}_3\text{COOH}} - (F_{\text{CH}_3\text{COOH}} + dF_{\text{CH}_3\text{COOH}}) + R_{\text{CH}_3\text{COOH}} * dV = 0$$

$$dF_{\text{CH}_3\text{COOH}} = R_{\text{CH}_3\text{COOH}} * dV$$

$$-F_{\text{CH}_3\text{COOH},8} * dx_{\text{CH}_3\text{COOH}} = -k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH}} * dV$$

$$-F_{\text{CH}_3\text{COOH},8} * dx_{\text{CH}_3\text{COOH}} = -k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8} * \frac{1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}{1+\epsilon*x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} * dV$$

Massabalans integreren:

$$\int_0^{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} \frac{1+\epsilon x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}{1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} * dx_{\text{CH}_3\text{COOH}} = \int_0^V \frac{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} * dV$$

$$\int_0^{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} \frac{1}{1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} dx_{\text{CH}_3\text{COOH}} + \int_0^{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} \frac{\epsilon x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}{1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}} dx_{\text{CH}_3\text{COOH}} = \int_0^V \frac{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} dV$$

$$\int_{u_1}^{u_2} \frac{1}{u} * -du + \epsilon * \int_{u_1}^{u_2} \frac{1-u}{u} * -du = \frac{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} \int_0^V dV \text{ met substitutie } u = 1 - x_{\text{CH}_3\text{COOH}}$$

$$-[\ln(u)]_{u_1}^{u_2} - \epsilon [\ln(u) - u]_{u_1}^{u_2} = \frac{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} V$$

$$[\ln(1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}})]_{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}^0 + \epsilon [\ln(1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}) - (1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}})]_{x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}^0 = \frac{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} V$$

$$V = \frac{F_{\text{CH}_3\text{COOH},8}}{k_2 * C_{\text{CH}_3\text{COOH},8}} * ((1 + \epsilon) * \ln\left(\frac{1}{1-x_{\text{CH}_3\text{COOH}}}\right) - \epsilon * x_{\text{CH}_3\text{COOH}})$$

Expansiefactor:

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

$$\epsilon = \frac{(2.025+8.1+8.1+5.95+1.9)-(2.025+8.1+10+10)}{(2.025+8.1+10+10)} = -0.134$$

Initiële concentratie:

$$C_{\text{CH}_3\text{COOH},8} = \frac{y_{\text{CH}_3\text{COOH},8} * P_8}{R * T_8} = \frac{0.269 * 1 \text{ atm}}{0.08205 \frac{\text{m}^3 * \text{atm}}{\text{K} * \text{kmol}} * 400 \text{ K}} = 8.2 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

Volume uitwerken:

$$V = \frac{8.1 \frac{\text{mol}}{\text{h}}}{0.1 \frac{1}{\text{h}} * 8.2 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}} ((1 - 0.134) * \ln\left(\frac{1}{1-0.9}\right) + 0.134 * 0.9) = 20.89 \text{ m}^3$$