การออกแบบและการควบคุมหอกลั่นแบบเกิดปฏิกิริยา สำหรับการผลิตบิวทิลอะซิเตตจากกรดอะซิติกเจือจาง

นางสาวจันทรวดี วิวิธนาภรณ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2549

DESIGN AND CONTROL OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR THE PRODUCTION OF BUTYL ACETATE FROM DILUTE ACETIC ACID

Miss Chantarawadee Wiwittanaporn

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering Program in Chemical Engineering
Department of Chemical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University
Academic Year 2006

Thesis Title	DESIGN AND CONTROL OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR THE PRODUCTION OF BUTYL ACETATE FROM DILUTE ACETIC ACID
By	Miss Chantarawadee Wiwittanaporn
Field of Study	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Amornchai Arpornwichanop, D. Eng.
Thesis Co-Advisor	Associate Professor Suttichai Assabumrungrat, Ph.D.

Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

..... Dean of the Faculty of Engineering
(Professor Direk Lavansiri, Ph. D.)

THESIS COMMITTEE

..... Chairman
(Professor Piyasan Praserthdam, Dr. Ing.)

..... Thesis Advisor
(Amornchai Arpornwichanop, D.Eng.)

..... Thesis Co-Advisor
(Associate Professor Suttichai Assabumrungrat, Ph.D.)

..... Member
(Soorathep Kheawhom, Ph.D.)

..... Member
(Assistant Professor Worapon Kiatkittipong, D.Eng.)

จันทรวดี วิวิธนาภรณ์: การออกแบบและการควบคุมหอกลั่นแบบเกิดปฏิกิริยาสำหรับการผลิตบิวทิลอะซิเตตจากกรดอะซิติกเจือจาง (DESIGN AND CONTROL OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR THE PRODUCTION OF BUTYL ACETATE FROM DILUTE ACETIC ACID) อ. ที่ปรึกษา: อ. ดร. อมรชัย อาภรณ์วิชานพ, อ. ที่ปรึกษาร่วม: รศ. ดร. สุทธิชัย อัสสะบำรุงรัตน์ 86 หน้า.

การนำกรดอะซิติกเจือจางกลับไปใช้ประโยชน์เป็นเรื่องที่มีความสำคัญเพื่อเป็นการเพิ่มมูลค่าทางเศรษฐศาสตร์แล้วยังเป็นการลดปัญหาทางสิ่งแวดล้อมอีกด้วย งานวิจัยนี้มุ่งเน้นที่การประยุกต์ใช้การกลั่นแบบมีปฏิกิริยาสำหรับนำกรดอะซิติกเจือจางกลับไปใช้ประโยชน์ โดยศึกษาการสังเคราะห์บิวทิลอะซิเตตจากปฏิกิริยาเอสเทอริฟิเคชันของกรดอะซิติกเจือจางและบิวทานอลในหอกลั่นแบบมีปฏิกิริยาโดยใช้โปรแกรมไฮซิส (HYSYS) ผลการคำนวณที่ได้จากแบบจำลองโดยใช้โปรแกรมไฮซิสถูกเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่รายงานในวารสารวิชาการ จากการเปรียบเทียบพบว่าผลการคำนวณมีความถูกต้อง หลังจากนั้นได้เริ่มศึกษาถึงผลของความเข้มข้นของกรดอะซิติกเจือจางที่มีต่อการผลิตบิวทิลอะซิเตต นอกจากนี้ยังได้ศึกษาผลของตัวแปรการดำเนินงานที่สำคัญเพื่อใช้ในการออกแบบหอกลั่นแบบมีปฏิกิริยา สุดท้ายได้ทำศึกษาการควบคุมแบบวงปิดของหอกลั่นแบบมีปฏิกิริยาโดยได้ทำการออกแบบโครงสร้างการควบคุม 2 โครงสร้างสำหรับการผลิตบิวทิลอะซิเตตโดยใช้กรดอะซิติกที่มีความเข้มข้น 80% โดยน้ำหนัก และได้ทำการทดสอบระบบควบคุมโดยกำหนดให้อัตราการไหลและความเข้มข้นของกรดอะซิติกที่เข้าหอกลั่นมีการเปลี่ยนแปลง

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต จันทรวดี วิวิธนาภรณ์

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา อมรชัย อาภรณ์วิชานพ

ปีการศึกษา 2549 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

##4870244121 :MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORDS: RECOVERY/ DILUTE ACETIC ACID/ REACTIVE DISTILLATION/ BUTYL ACETATE PRODUCTION

CHANTARAWADEE WIWITTANAPORN: DESIGN AND CONTROL OF A REACTIVE DISTILLATION COLUMN FOR THE PRODUCTION OF BUTYL ACETATE FROM DILUTE ACETIC ACID. THESIS ADVISOR: AMORNCHAI ARPORNWICHANOP, D.Eng., THESIS COADVISOR: ASSOC. PROF. SUTTICHAI ASSUBUMRUNGRAT, Ph.D., 86 pp.

Recovery of the dilute acetic acid becomes important issues due to economic and environmental awareness. The present research is focused on the application of a reactive distillation as a potential alternative method for dilute acetic acid recovery. The synthesis of butyl acetate, from esterification of dilute acetic acid with butanol in the reactive distillation is investigated with HYSYS commercial software. The model prediction by the HYSYS simulator is validated with experimental results reported in literature and a good agreement is observed. The effect of dilute acetic acid concentration on reactive distillation performances in terms of butyl acetate production is first studied. The influences of key operating variables on the performance of the reactive distillation are also evaluated in order to design the reactive distillation. Finally, the closed-loop control of a reactive distillation column is explored. Two alternative control structures are evaluated using 80 wt% acetic acid concentration for the production of butyl acetate. Disturbances in fresh feed flow rate and compositions are made to examine the rangeability of the control structures.

Department Chemical Engineering	Student's signature Chantarawadee Wiwittanaporn
Field of study Chemical Engineering	Advisor's signature Amornchai Arpornwichanop
Academic year 2006	Co-advisor's signature

ACKNOWLEDGEMENTS

The author would like to thanks and express her sincere gratitude to her advisor, Dr. Amornchai Apornwichanop, and co-advisor, Associate Professor Suttichai Assabumrungrat, for their valuable suggestions, useful discussions throughout this research. Moreover, the author would also be thankful to Professor Piyasan Praserthdam, as the chairman, and Dr. Soorathep Kheawhom and Assistant Professor Worapon Kiatkittipong, as the members of the thesis committee for many valuable suggestions.

The financial supports from the Graduate school of Chulalongkorn University are gratefully acknowledged. The author also thanks to the members of the Control and Systems Engineering Laboratory for their assistance.

Finally, the author would like to express the highest gratitude to her parent and family for their love, inspiration, encouragement and financial support throughout this study.

TABLE OF CONTENTS

CHAPTER Page

Page

LIST OF TABLES

LIST OF FIGURES

Page

NOMENCLATURE

a_i	activity of component i	[-]
A_{ij}	binary parameters of NRTL equation	[-]
B_{ij}	binary parameters of NRTL equation	[-]
G_{ji}	binary interaction parameter in NRTL equation	[-]
K_c	controller gain	
k_f	the forward rate	$[kg/m^3 \cdot s]$
K_{eq}	the reaction equilibrium constants	[-]
n	total number of components	[-]
Nr	number of rectification zone	[tray]
Nrxn	number of reactive zone	[tray]
Ns	number of stripping zone	[tray]
P	pressure	[atm]
ΔP	pressure drop	[atm]
RR	reflux ratio	[]-
T	temperature	[K]
V_{max}	maximum velocity	[ft/sec]
x_i	mole fraction of component i	[-]
X_i	conversion of component i	[%]

Abbreviations

BuOAc	butyl acetate	[-]
BuOH	butanol	[-]
H_2O	water	[-]
HOAc	acetic acid	[-]

Greeks Symbols

α_{ij}	relative volatility of component i with respect to component j for VLE ($\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$)	[-]
γ_i	activity coefficient of component i	[-]
ρ_V	vapor density	[lb/ft^3]
τ_{ij}	binary interaction parameter	[-]
τ_I	integral time	[min]
τ_d	derivative time	[min]