C8 AROMATICS EXTRACTIVE DISTILLATION STUDY : SOLVENT SELECTION AND PROCESS MODELING

MRS. PIMPORN LEK-UTAIWAN

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF DOCTOR OF ENGINEERING (CHEMICAL ENGINEERING)
FACULTY OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S UNIVERSITY OF TECHNOLOGY THONBURI
2010

C8 Aromatics Extractive Distillation Study: Solvent Selection and Process Modeling

Mrs. Pimporn Lek-utaiwan M. Eng. (Chemical Engineering)

A Thesis Submited in Partial Fulfillment of the Requirements for
the Degree of Doctor of Engineering (Chemical Engineering)
Faculty of Engineering
King Mongkut's University of Technology Thonburi
2010

Thesis Committee

..... Chairman of Thesis Committee
(Assoc. Prof. Suvit Tia, D.Eng.)

..... Member and Thesis Advisor
(Lect. Bunyaphat Suphanit, Ph.D.)

..... Member and Thesis Co-Advisor
(Nakarin Mongkolsiri, D.Eng.)

..... Member
(Assoc.Prof. Thongchai Srinaphakhun, Ph.D.)

..... Member
(Lect. Hong-ming Ku, Ph.D.)

Thesis Title	C8 Aromatics Extractive Distillation Study: Solvent Selection and Process Modeling
Thesis Credits	36
Candidate	Mrs. Pimporn Lek-utaiwan
Thesis Advisors	Dr. Bunyaphat Suphanit Dr. Nakarin Mongkolsiri
Program	Doctor of Engineering
Field of Study	Chemical Engineering
Department	Chemical Engineering
Faculty	Engineering
B.E.	2553

Abstract

A practical methodology for the design and optimization of extractive distillation is proposed in this research work. The separation of C8-aromatics isomer-mixture, as a real industrial case, is studied to illustrate the proposed methodology. The extractive distillation is generally applied to the separation of close-boiling mixtures, which by conventional distillation is difficult to separate. The combination of several computer-aided tools, such as, ProCAMD® in conjunction with the driving force concept by ICAS® and Aspen Plus® are employed as a starting point in the solvent selection. However, the experimental verification was also proved to be very crucial to achieve a successful design. In the experimental work, the VLE data of the solvents and hydrocarbon system needed to be examined, checked for thermodynamic consistency, and regressed for binary interaction parameters of the physical property package to accurately represent the real behavior of the system in the design. Finally, rigorous process design and optimization via Aspen Plus®, can produce a successful optimized design. The base-cases of the three potential solvents are firstly developed and then further optimized in terms of both energy consumption and the economic aspects. In this study, the optimization task is proposed to be carried out by using payback period as the objective function rather than the typical total annualized cost. In addition, the results from both objective functions can be illustrated and compared to understand the results of applying different objective function. The optimized design in the case study is achieved with less than two years of payback period.

Keywords : C8-Aromatics/ Extractive Distillation/ Computer-Aided Tools/ Process Design and Optimization

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาระบบการกลั่นแบบใช้ตัวทำละลายกับระบบกลั่นแยกซีแปดอะโรมาติกส์ ในด้านการเลือกตัวทำละลายและการออกแบบแบบจำลองของระบบ
หน่วยกิต	36
ผู้เขียน	นางพิมพร เล็กอุทัยวรรณ
อาจารย์ที่ปรึกษา	ดร.บุณยพัต สุภานิช
	ดร.นครินทร์ มงคลศิริ
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรดุษฎีบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
คณะ	วิศวกรรมศาสตร์
พ.ศ.	2553

บทคัดย่อ

ในงานวิจัยนี้เป็นการนำเสนอระเบียบวิธีในการออกแบบระบบการกลั่นแบบใช้ตัวทำละลาย ซึ่งเป็นขั้นตอนใหม่ที่ไม่ยุ่งยากซับซ้อน และสามารถนำไปประยุกต์ใช้งานจริงในการออกแบบกระบวนการแยกสารเอททิลเบนซินออกจากสารซีแปดอะโรเมติกส์จากอุตสาหกรรมปิโตรเคมีในประเทศไทย ซึ่งผลลัพธ์สุดท้ายของการออกแบบกระบวนการผลิตที่ได้จากงานวิจัยนี้ มีความคุ้มค่าทางเศรษฐศาสตร์พอจะนำไปสร้างเป็นกระบวนการผลิตจริงที่สามารถคืนทุนได้ภายในระยะเวลาแค่สองปีเท่านั้น

สำหรับระบบการกลั่นแบบใช้ตัวทำละลายนั้น เป็นกระบวนการที่เหมาะสมสำหรับใช้การแยกสารที่มีจุดเดือดใกล้เคียงกันมากเกินกว่าที่ระบบการกลั่นแบบธรรมดาจะสามารถประยุกต์ใช้ได้ แต่เนื่องจากการเลือกตัวทำละลายที่เหมาะสมนั้นเป็นงานที่ค่อยข้างยากและใช้เวลานาน เมื่อต้องทำการทดลองกับทุกตัวทำละลายที่เป็นไปได้ ดังนั้นขั้นตอนการออกแบบที่เสนอในงานวิจัยนี้จะเริ่มต้นด้วยการประยุกต์ใช้คอมพิวเตอร์ซอฟแวร์ ได้แก่ ProCAMD®, ICAS® และ Aspen Plus® มาช่วยในการเลือกตัวทำละลายที่เหมาะสมเบื้องต้นก่อนการทำการทดลองในขั้นต่อไป อย่างไรก็ตามขั้นตอนการทดสอบตัวทำละลายด้วยการทำการทดลองนั้นมีความสำคัญมาก เนื่องจากคอมพิวเตอร์ซอฟแวร์ดังที่กล่าวมาข้างต้นเป็นเพียงตัวช่วยในการเลือกแค่เบื้องต้นเท่านั้น ไม่สามารถนำข้อมูลประสิทธิภาพของตัวทำละลายไปใช้ในการออกแบบได้จริง ดังนั้นขั้นตอนที่จำเป็นหลังจากที่เลือกตัวทำละลายได้แล้วนั้นคือ การตรวจสอบคุณสมบัติของตัวทำละลายเพื่อหาข้อมูลสมดุลไอ-ของเหลวของระบบ เพื่อนำ

ข้อมูลที่ได้ไปใช้ในการออกแบบกระบวนการผลิตที่ถูกต้องต่อไป ในงานวิจัยนี้โปรแกรม Aspen Plus® ได้ถูกใช้เป็นโปรแกรมหลักในการออกแบบกระบวนการผลิตที่เหมาะสมที่สุด โดยที่เป้าหมายของการออกแบบระบบในงานวิธีการออกแบบที่นำเสนอในงานวิจัยนี้ คือให้ได้ระบบที่มีระยะเวลาการคืนทุนที่สั้นที่สุดแทนที่จะเป็นการออกแบบระบบที่มีค่าใช้จ่ายที่ต่ำที่สุด ดังเช่นกระบวนการออกแบบที่ใช้กันอยู่ทั่วไป ทั้งนี้การออกแบบโดยตั้งเป้าหมายทั้งสองแบบนี้จะให้ผลลัพธ์ที่แตกต่างกัน ซึ่งได้นำมาเปรียบเทียบผลให้เห็นอย่างชัดเจน รวมถึงการทำการวิเคราห์ความสำคัญของตัวแปรต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้องกับการออกแบบต่อระยะเวลาในการคืนทุนของกระบวนการผลิตแบบต่าง ๆ ด้วย

คำสำคัญ: ซีแปดอะโรเมติกส์ / การกลั่นแบบใช้ตัวทำละลาย / การออกแบบโดยใช้คอมพิวเตอร์ / การออกแบบระบบและการออกบบระบบให้เหมาะสมที่สุด

ACKNOWLEDGEMENTS

The idea of the study was initiated by SCG Chemicals Co., Ltd. with the aim to upgrade low-value byproducts from the cracker plant. The financial support was then fully funded by the company, so it is gratefully acknowledged by the author.

With the invitation from Dr.Hong-ming Ku, ChEPS' director, then the projects can be formulated as the PhD thereby giving the academic value as well as the industrial benefit. So, the author would like to give a sincere thank to him as the first person.

However, without the great supports from the advisors, Dr.Bunyaphat Suphanit and Dr.Nakarin Mongkolsiri, the thesis could not have been successfully completed with the wonderful results as it was. Therefore, please accept the sincere thanks from the author as well.

The authors would like to also sincerely thank Professor Rafiqul Gani for his advisory on the solvent selection part. Together with the ICAS® software from CAPEC, Technical University of Denmark, the work was successfully achieved.

Furthermore, special thank to ChEPS, the Chemical Engineering Department, University of Waterloo, and all my colleagues in the Research and Technology Office, especially our research assistants, for sharing, supporting, facilitating the works.

Finally, the wonderful support and understanding from my family are the best thing that led me to this end without being exhausted.

Thank you so much.

CONTENTS

LIST OF TABLES

LIST OF FIGURES

FIGURE PAGE

FIGURE PAGE