การพัฒนาโปรแกรมเลียนแบบการทำงานของหอกลั่น

นางสาวสุธาสินี แก้วพวงงาม

วิทยานิพนธ์เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2539

ISBN 974-634-948-1

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I 17390984

DEVELOPMENT OF A SIMULATOR FOR DISTILLATION COLUMNS

Miss Sutasinee Kaewpuang-ngam

A Thesis Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements

for the Degree of Master of Engineering

Department of Chemical Engineering

Graduate School

Chulalongkorn University

1996

ISBN 974-634-948-1

Thesis Title	Development of a Simulator for Distillation Columns
By	Miss Sutasinee Kaewpuang-ngam
Department	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Assistant Professor Tawatchai Charinpanitkul, Dr. Eng.
Thesis Co-Advisor	Deacha Chatsiriwech, Ph. D.

Accepted by Graduate School, Chulalongkorn University in Partial Fulfilment of the Requirements for the Master's Degree.

.....Dean of Graduate School

(Associate Professor Santi Thoongsuwan, Ph. D.)

Thesis Committee

.....Chairman

(Professor Wiwut Tanthapanichakoon, Ph. D.)

.....Thesis Advisor

(Assistant Professor Tawatchai Charinpanitkul, Dr. Eng.)

.....Thesis Co-Advisor

(Deacha Chatsiriwech, Ph. D.)

.....Member

(Tarathorn Mongkonsri, Ph. D.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

สุธาสินี แก้วพวงงาม : การพัฒนาโปรแกรมเลียนแบบการทำงานของหอกลั่น (DEVELOPMENT OF A SIMULATOR FOR DISTILLATION COLUMNS) อ. ที่ปรึกษา : ผศ. ดร. ธวัชชัย ชรินพาณิชกุล, อ. ที่ปรึกษาร่วม : ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช, 169 หน้า. ISBN 974-634-948-1

งานวิจัยนี้ได้พัฒนาโปรแกรมเลียนแบบการทำงานของหอกลั่นโดยใช้ภาษา ซี พลัส พลัส (C++) สำหรับกระบวนการกลั่นที่มีจำนวนองค์ประกอบไม่เกิน 10 องค์ประกอบ และจำนวนชั้นไม่เกิน 100 ชั้น แบบจำลองของหอกลั่นที่ใช้ในการจำลองกระบวนการกลั่นเป็นชั้นสมดุล โดยที่สามารถป้อนวัตถุดิบ ดึงผลิตภัณฑ์ที่เป็นของเหลวหรือไอ และถ่ายเทความร้อนเข้าหรือออกได้ในแต่ละชั้นสมดุลนั้น ๆ โดยผู้ใช้เป็นผู้กำหนดค่าเหล่านั้น การคำนวณค่าคุณสมบัติของสารสามารถเลือกใช้สมการสำหรับก๊าซอุดมคติ หรือสมการสำหรับก๊าซจริงซึ่งคำนวณโดยใช้แบบจำลองของเพ็งโรบินสัน (Peng-Robinson model) หรือแบบจำลองของโซฟ เรดิช หว่อง (Soave Redlich Kwong model) การคำนวณการกลั่นใช้วิธีการหาจุดเดือดของระบบหลายองค์ประกอบ โดยการแก้สมการซึ่งอยู่ในรูปของไตรไดอะโกนอลแมทริกซ์ (Tridiagonal matrix) ด้วยวิธีของโธมัส (Thomas method) โปรแกรมนี้ประกอบด้วยส่วนติดต่อกับผู้ใช้ทางกราฟฟิก ผู้ใช้สามารถป้อนข้อมูลผ่านหน้าต่างของโปรแกรมซึ่งทำงานร่วมกับโปรแกรมวินโดวส์ ผลการคำนวณแสดงในรูปของตารางและกราฟ

การตรวจสอบผลการคำนวณของโปรแกรมทำได้โดยตรวจสอบจากการดุลมวลสารพบว่าค่าความผิดพลาดไม่เกิน ±3.39% ส่วนค่าความแตกต่างของอุณหภูมิเมื่อเปรียบเทียบกับค่าจากหนังสืออ้างอิงมีค่าไม่เกิน ±0.46% และมีค่าไม่เกิน ±1.19% เมื่อเปรียบเทียบกับโปรแกรมไฮซิม (HYSIM)

ภาควิชา วิศวกรรม เคมี ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา วิศวกรรม เคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2539 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสีเขียวนี้เพียงแผ่นเดียว

C617011 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING
KEY WORD: DISTILLATION/ SIMULATOR/ TRIDIAGONAL MATRIX/ OBJECT ORIENTED PROGRAMMING (OOP)
SUTASINEE KAEWPUANG-NGAM : DEVELOPMENT OF A SIMULATOR FOR DISTILLATION COLUMNS. THESIS ADVISOR : ASST. PROF. TAWATCHAI CHARINPANITKUL, Dr. Eng., THESIS CO-ADVISOR : DEACHA CHATSIRIWECH, Ph. D. 169 pp. ISBN 974-634-948-1

In this work, the simulator for distillation calculation was developed by using C++ language. It could be used to solve distillation problems with maximum 10 components and 100 equilibrium stages. Each equilibrium stage was composed of a feed stream, liquid and vapor sidestreams and a side exchanger for cooling or heating. The model described both ideal gas behaviour and real gas behaviour corresponding to Peng-Robinson or Soave Redlich Kwong models. The bubble-point method was used to solve the problem. The system of equations were solved by Thomas method. This simulator had to be run on Microsoft Windows version 3.1 or later in order to provide a lot of convenient Graphic User Interfaces. Users had to input data into dialogs or windows of this simulator. The results of calculation were displayed both in tabular form and in graphic form.

The results of calculation were investigated by checking the material balance of the column and were compared to reference data and results obtained from a commercial simulator named HYSIM. It was found that the difference was ±3.39% for the material balance, ±0.46% for temperature compared to reference data and ±1.19% for the results of equilibrium stage compared to HYSIM.

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่อนิสิต .....

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....

ปีการศึกษา 2539 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

ACKNOWLEDGEMENT

The author would like to express her gratitude to Assistant Professor Tawatchai Charinpanitkul, Dr. Eng, for his greatest guidance, suggestions, supervision and encouragement. She wishes to give her gratitude to Dr. Deacha Chatsiriwech for his guidance, his helpful suggestion, discussion, and encouragement. She would like to give her gratitude to Dr. Veerapot Lueprasitsakul and Dr. Somprasong Srichai for their suggestion and helpful discussion. She is also grateful to Professor Wiwut Tanthapanichkoon, Ph. D., and Dr. Tharathon Monkhonsi for serving as Chairman and members of the thesis evaluating committees, respectively.

This work has been supported by Graduate School, Chulalongkorn University. The Author would like to express her deep appreciation herein.

Finally, the author would like to give her sincere thanks to her parents, everyone in her family, her friends and Process System Engineering Laboratory members for their encouragement throughout this study

CONTENTS

	PAGE
ABSTRACT(THAI)	iv
ABSTRACT(ENGLISH)	v
ACKNOWLEDGEMENT	vi
LIST OF TABLES	viii
LIST OF FIGURES	x
NOMENCLATURE	xii
CHAPTER	
I INTRODUCTION	1
II LITERATURE REVIEW	3
III FUNDAMENTAL OF DISTILLATION	7
IV DEVELOPMENT OF SIMULATOR	26
V PROGRAM VERIFICATION	55
VI DISCUSSION	87
VII SUMMARY AND RECOMMENDATIONS	92
REFERENCES	94
APPENDIX A	97
APPENDIX B	167
VITA	169

LIST OF TABLES

TABLE PAGE

4.1 Summary of input data 34

4.2 Summary of the output 44

4.3 Summary of commands in the File menu 50

4.4 Summary of commands in the Select menu 51

4.5 Summary of commands in the Edit menu 52

4.6 Summary of commands in the Report menu 53

5.1 Summary of the maximum material balance relative errors.. 68

5.2 Comparison of temperature profiles of caseIII to the reference data 69

5.3 Comparison of liquid compositions of benzene to the reference data 70

5.4 Comparison of liquid compositions of ethylbenzene to the reference data 71

5.5 Comparison of liquid compositions of toluene to the reference data 72

5.6 Comparison of temperature profiles for case I 74

5.7 Summary of the maximum relative errors of temperature compared to HYSIM 76

5.8 Comparison of vapor composition of n-butane to HYSIM (CaseI) 76

TABLE PAGE

5.9 Comparison of vapor composition of n-pentane to HYSIM (Case I) 77

5.10 Comparison of vapor composition of propane to HYSIM (Case I) 78

5.11 Summary of the maximum relative errors of vapor composition compared to HYSIM 79

5.12 Comparison of liquid compositions of n-butane to HYSIM (Case I) 80

5.13 Comparison of liquid compositions of n-pentane to HYSIM (Case I) 81

5.14 Comparison of liquid compositions of propane to HYSIM (Case I) 82

5.15 Summary of the maximum relative error of liquid composition compared to HYSIM 83

5.16 The total material balance relative errors of case V 85

LIST OF FIGURE

FIGURE		PAGE
2.1	The combining sure and fast model	4
3.1	Equilibrium stage	8
3.2	Algorithm for Wang-Henke BP method (Henry, E.J.,1981)	17
3.3	An Algorithm for solving the bubble point temperature	21
3.4	An Algorithm for solving the bubble point temperature using equation of state. (Sandler, S. I.,1989)	22
4.1	The dialog for selecting component	27
4.2	The column configuration dialog	28
4.3	The feed dialog	29
4.4	The dialog for input feed composition	30
4.5	The top product dialog	31
4.6	The bottom product dialog	31
4.7	The side stream dialog	32
4.8	The dialog for entering heat transfer data	33
4.9	The output window	36
4.10	The vapor composition window	37
4.11	The liquid composition window	38
4.12	The stage variables window	39
4.13	The temperature profiles plotted on output window	38
4.14	The vapor composition profiles plotted on the output window	41
4.15	The liquid composition profiles plotted on the output window	42

FIGURE PAGE

4.16 The model of the condensor (stage 1) 46

4.17 Flowchart of this simulator 48

4.18 The main window of distillation simulator 49

4.19 The help file for distillation simulator 54

5.1 The error of material balance equation for case I 62

5.2 The error of material balance equation for case II 63

5.3 The error of material balance equation for case III 64

5.4 The error of material balance equation for case IV 65

5.5 The error of material balance equation for case V 66

5.6 Temperature profile of case III 69

5.7 Liquid composition of benzene (Case III) 70

5.8 Liquid composition of ethylbenzene (Case III) 71

5.9 Liquid composition of toluene (Case III) 72

5.10 Temperature profiles of case I calculated by DIST and HYSIM 75

5.11 Vapor composition profiles of n-butane on Case I 77

5.12 Vapor composition profiles of n-pentane on Case I 78

5.13 Vapor composition profiles of propane on Case I 79

5.14 Liquid composition profiles of n-butane on Case I 80

5.15 Liquid composition profiles of n-pentane on Case I 81

5.16 Liquid composition profiles of propane on Case I 82

5.17 The total material balance relative errors of caseV 86

NOMENCLATURE

C	Number of components
F	Feed stream flowrate to stage (kg mole/hr)
H	Enthalpy (J/kg mole)
K	Vapor-Liquid equilibrium ratio
L	Liquid interstage flowrate (kg mole/hr)
N	Number of stages
P	Pressure (Bar)
P*	Vapor pressure (Bar)
Q	Heat duty to/from stage
T	Temperature (K)
U	Liquid sidestream flowrate (kg mole/hr)
V	Vapor interstage flowrate (kg mole/hr)
W	Vapor sidestream flowrate (kg mole/hr)
x	Mole fraction in liquid phase
y	Mole fraction in vapor phase
z	Overall mole fraction

Subscripts

F	Feed
i	Component
j	Stage number
L	Liquid
V	Vapor

Superscripts

k	Number of iterations
o	Ideal Gas