

第五章 整廠控制與動態模擬

在這能源越來越匱乏的時代，再生能源發展亦有其難度且難以普遍化的情形下，節能的技術逐漸成了工業界所重視的議題。在本研究中是以張文騰學長之醋酸乙酯生產製程為整廠穩態設計架構(如圖 5-1 所示)，且利用其 Aspen Plus 模擬之靜態數據做為初始條件，並在此動態模擬測試中驗證其可行性。研究中所使用的動態模擬軟體，為研究室所自行發展撰寫的 FORTRAN 程式；而整廠控制之結構，則(如圖 5-2 所示)。

5.1 整廠製程穩態設計

如圖 5-1 所示，為了符合工廠實際的生產方式，本研究在醋酸與乙醇之原始進料的選擇上，是以工業醋酸 95 mol % (含水 5 %) 與工業乙醇 87 mol % (含水 13 %) 來操作。在反應觸媒的選擇上，則採用歐洲共同市場所發表的陽離子交換樹脂 Purolite CT179 (Hangx et al., 2001)，其對於酯化反應具有良好的催化能力，且由於為異相催化，反應，所以較沒有傳統液體酸觸媒在分離上所遭遇的困難。

預先反應器進料條件：

根據反應速率式(3.2)以及張文騰(2009)對不同酸醇進料量比的探

討，且依據勒沙特列原理(Le Chatelier's principle)，當酸醇比提高，酸相對於醇為過量試劑，有利於反應往生成醋酸乙酯方向進行，醇的轉化率因而獲得提升。所以在整廠的設計規劃上，將共沸塔塔底高純度的醋酸回流與進料之醋酸及乙醇混合後再進入預先反應器，以提升預先反應器之進料酸醇比，進而提升醇的轉化率。

蒸餾塔的設計方針：

由於為達到研究需求共沸塔的塔頂物流含有 EtOAc、H₂O、HAc 此三種成份在所操作條件下可能會產生分相行為，因此在塔頂加設分相器，用來將水相及有機相分離。

1. 第一根塔蒸餾塔(共沸塔)：共沸塔設立的目的，為將預先反應器出料做進一步的分離及純化。設計方針為調整再沸器熱值、增加板數或改變迴流比以使得塔頂幾乎無醋酸存在，而塔底則為高純度未反應完之醋酸。
2. 第二根塔汽提塔 (純化塔)：純化塔設立的目的，主要是為了純化經過分相器處理之共沸塔塔頂物流的有機相成份，以得到產物。設計方針為調整再沸器熱值、增加板數以使得塔頂幾乎無醋酸存在，而塔底則為達到規格之產物醋酸乙酯。
3. 第三根塔蒸餾塔(除水塔)：除水塔設立的目的，主要是為了純化經共沸塔塔頂分相器處理後之水相成分。設計方針為調整再沸器

熱值、增加板數或改變迴流比使得塔底的產物水可以達到排放的規格。

由前述的熱力學分析及圖 3-2 (EtOH / EtOAc / H₂O 之 Binodal Curve)，可以發現當乙醇濃度在 20 mole % 下，會有液液分相的行為產生。所以在穩態設計時，使塔頂幾乎無醋酸存在，並將乙醇含量控製在 20 mole % 以下。另一方面，在此設計的四成份模擬中，預期地將沸點最大的醋酸作為過量試劑，未用完之醋酸從塔底流出並回收使用，其餘三成份 H₂O / EtOAc / EtOH 將之蒸餾至塔頂，再經由分相器的處理將有機相、水相分離。有機相部分，一部分作為汽提塔的進料，另一部分則迴流進共沸塔。至於水相則進入除水塔作後續處理，而除水塔的塔頂物流中含有未反應完的乙醇，則進入反應蒸餾器與共沸塔塔底物流中未反應完之高濃度醋酸繼續進行酯化反應。這樣的作法可以使整廠製程中的乙醇轉化率受到提升，也能夠減少原物料的浪費。

熱交換器設立之目的：

為了提升能源的有效再利用，整個廠中裝設了兩個熱交換器 (process to process heat exchanger)，如此可利用廠中的高溫物流段來加熱低溫物流段，其能夠將廢熱回收再利用；另一方面，其也可減少再沸器的熱負荷，以及額外的能源供應開銷。

5.2 整廠之基礎控制策略

整個製程最主要是由三根蒸餾塔所組成，分別為共沸塔 (azeotrope column, 簡稱 AZ)、純化塔 (purification Column, 簡稱 PF) 以及除水塔 (dehydration column, 簡稱 DH)，上游單元會影響下游單元，加上迴流的設計，整個製程為封閉的環路，彼此間連動性的不斷相互影響，使得製程不容易收斂。因此，需要加上基礎控制使得製程能在穩態下操作。而基於此製程設計提出合適之控制策略，皆是為了確保製程能夠符合商業化之條件。

基礎控制設計

整廠之基礎流量控制目的在滿足各個蒸餾塔基本液位控制，並顧及單元間管線之流量操控與反應計量平衡操作下，避免“滾雪球效應”而建立如圖 5-2 所示之整廠控制架構。液位控制與流量控制之動態模擬，在本研究中均視之為“完美控制”(perfect control)。參照 Luyben, et al. (1999) 之建議，將共沸塔內之再沸器液位高低視為系統內醋酸庫存量的大小，在液位控制下，考慮進料量與迴流量之間關係。在迴流路線則採取“流量控制”來固定共沸塔之塔底總出料量，而共沸塔塔底則以再沸器的液位高低，來操縱新鮮醋酸的進料流量，用以補充不足的醋酸庫存量，使得反應蒸餾器的酸進料量與醇進料量可以維持固定比例。除水塔之儲存槽液位高低則視為系統內未消化完

之乙醇庫存量的大小，為了使反應蒸餾器的反應可以順利進行，將進料酸、醇量維持在一定比例。因此，除水塔塔頂部分，採用儲存槽液位高低來控制回流量大小，使未反應完全之乙醇出料量得以維持固定值。另一方面，純化塔與除水塔之再沸器液位高低視為產物之庫存量大小，用液位控制產物流量。

至於在蒸餾塔之品質控制上，通常可以使用組成分析儀器控制，但因為考量成本與量測的時間延遲等問題，故改以較簡單的溫度控制器來取代組成分析控制器。溫度的量測可以提供一個可靠、迅速的線上推論控制方式，且價格較組成分析控制器便宜；其控制主要為確保塔底組成能維持一定濃度，避免組成干擾不斷地在系統中循環累積。另外 Luyben, et al. (1999)認為處理高純度蒸餾時，不適合使用雙點溫度控制策略，所以在研究中蒸餾塔皆採用單點溫度控制方式，以避免兩控制迴路之間會相互干擾，使得系統無法穩定。

溫控板的選擇

本研究中各塔單點溫度控制的量測板選擇，則是根據 Aspen Plus 模擬軟體增加或減少再沸器熱值，所得到的塔板溫度變化結果來作為溫度量測板的選擇依據，如圖 5-3~5-5 所示。由圖 5-3 可以發現，共沸塔中對再沸器熱值敏感度最高的應為 19~21 板；但由於 19 板距離塔底太遠，會造成時間延遲嚴重問題；而 20、21 板為進料板不適宜

作為溫控板，所以 22、23 板應是較適宜的選擇。因此，本研究考量 23 板較接近塔底再沸器，且與 21 板進料板尚有一板的緩衝距離；因此最後將最適溫控板定為第 23 板。另外由圖 5-4 與圖 5-5 的再沸器熱值敏感度測試結果顯示，純化塔的最適溫控板為第 5 板，除水塔則為第 16 板。因為最適溫控板的敏感度極高，當干擾發生可以迅速的偵測，並作及時的調整，使製程可以迅速獲得控制並在穩態下順利操作。

溫度控制的原理為量測各塔內之最適溫控板之溫度來調節再沸器熱值，使此板溫度獲得控制。各塔之溫度控制器皆為 PID 控制器，而管線中物流溫度的控制器則為 PI 控制器，其調諧參數採以文獻經驗法則與試誤法所求得。

穩態設計之結果

動態模擬之研究，主要在進行某些操作變數之改變，以觀察系統之動態變化，爾後可利用此結果，來分析操作變數與控制變數之間的關係，進而發展為整廠控制之探討與可行性。利用此動態模擬程式，搭配整廠基礎控制考量下，使其動態模擬運轉至一相當長時間後，即可獲得整廠控制設計之穩態操作結果。表 5.1 為整廠穩態之物流表，此結果與張文騰(2009)利用 Aspen Plus 模擬之結果幾乎完全相同。如此，亦可驗證本研究之 FORTRAN 程式之正確性。另一方面。各塔之塔結構數據如表 5.2 所示，而表 5.3 則為儀表與控制之設定範圍。

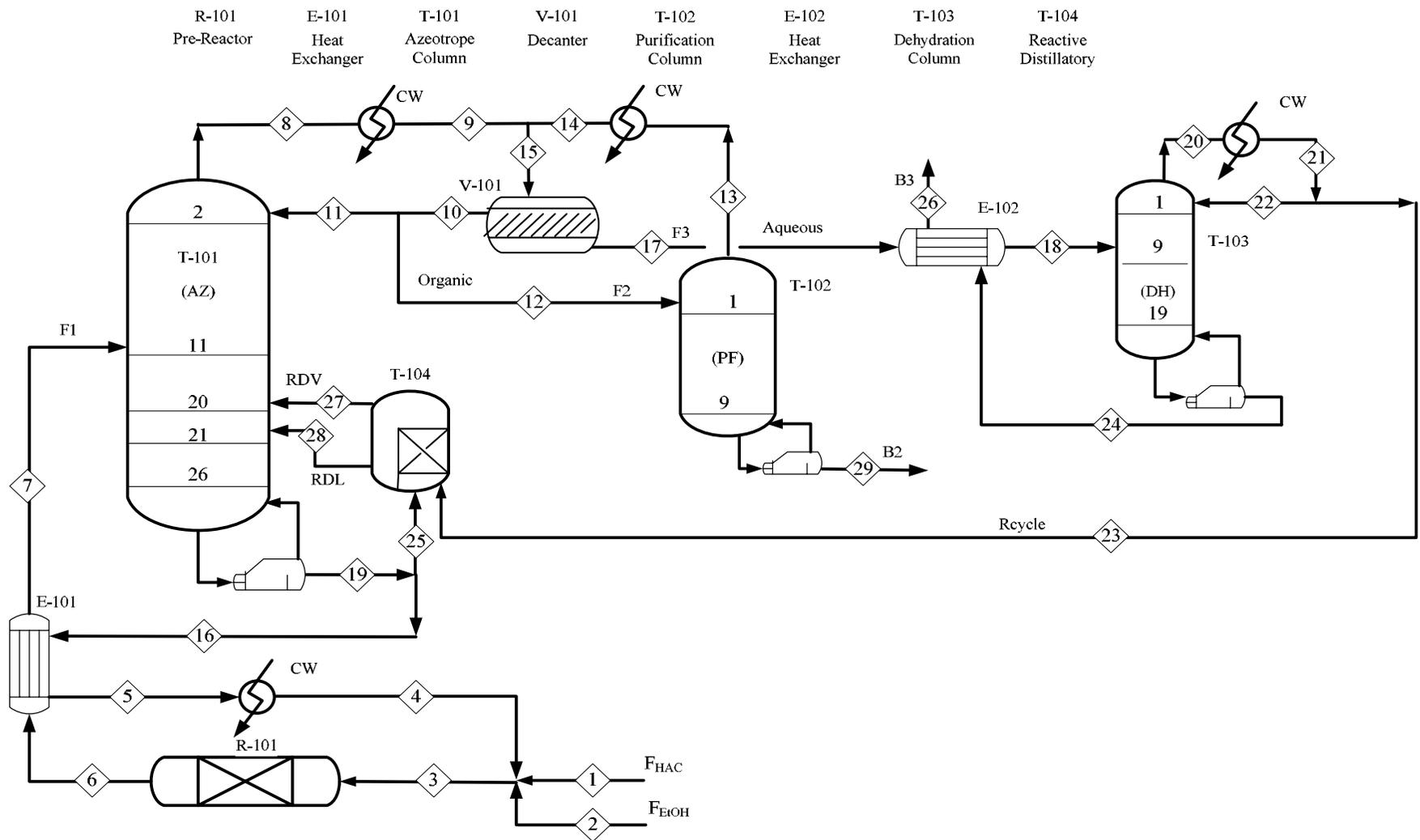


圖 5-1 整廠流程圖 (process flow diagram)

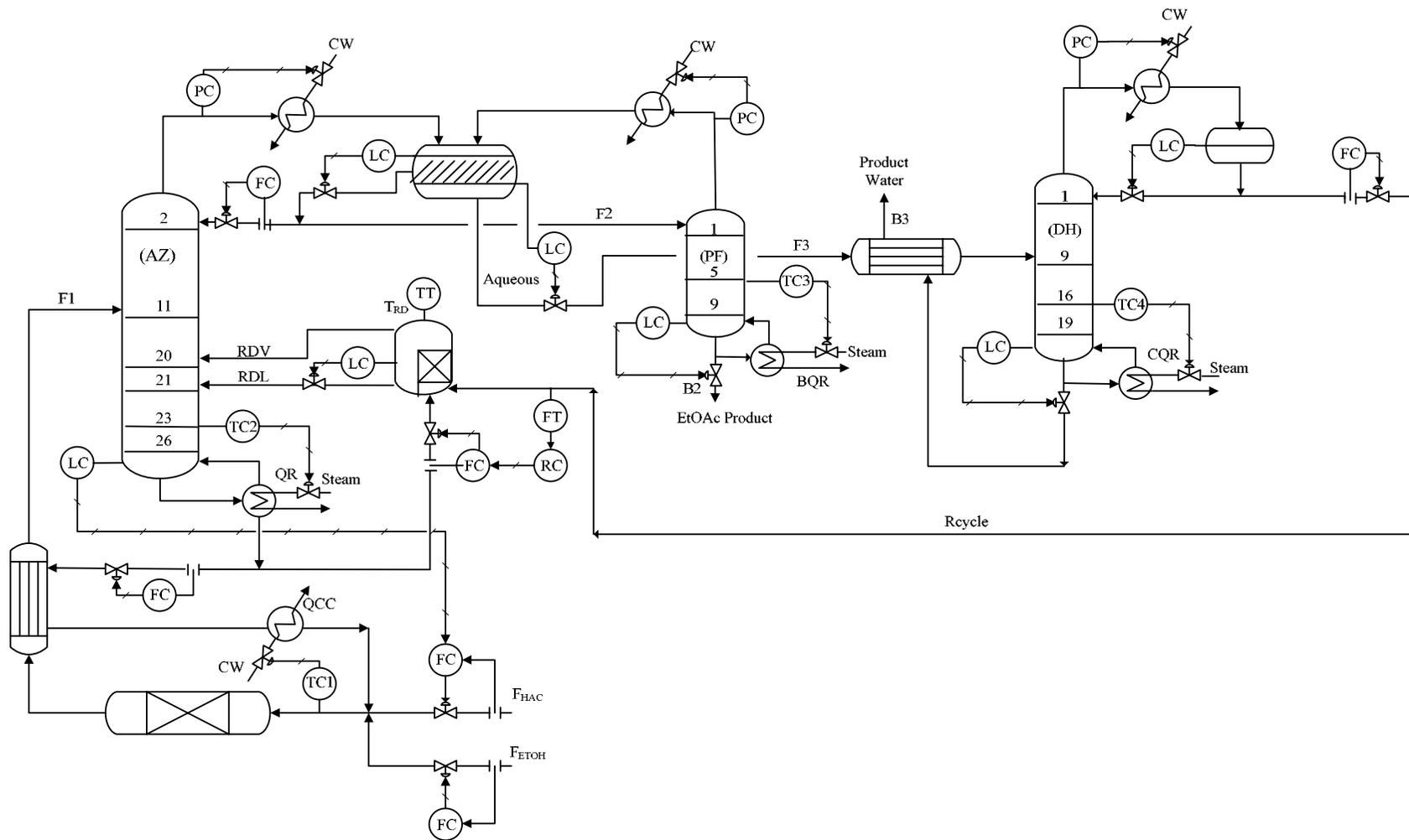


圖 5-2 整廠控制架構圖

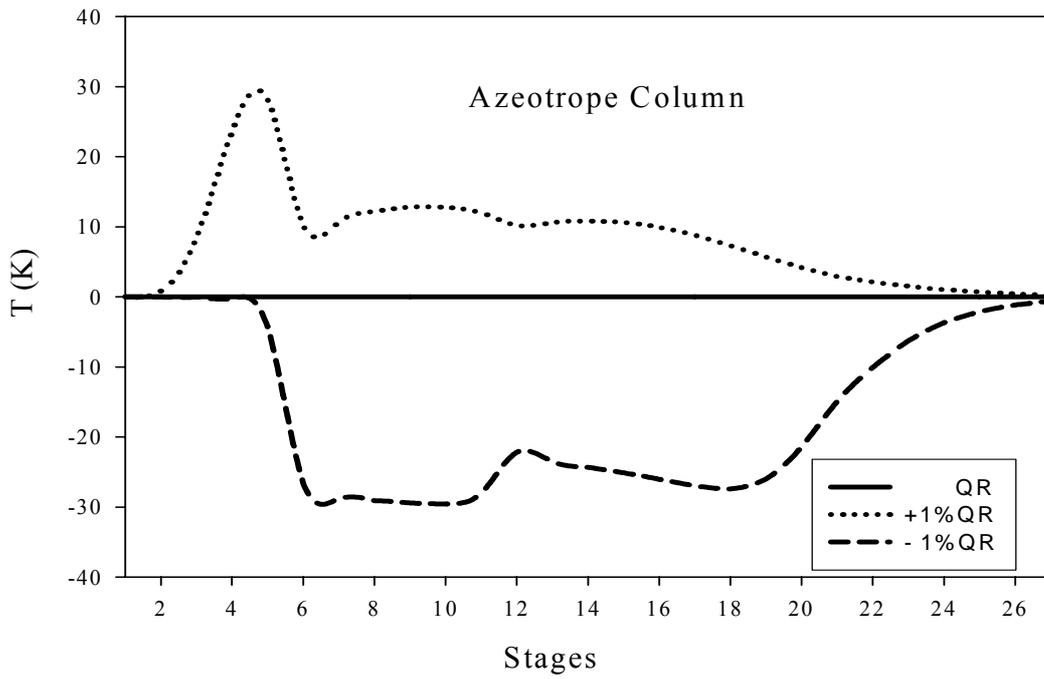
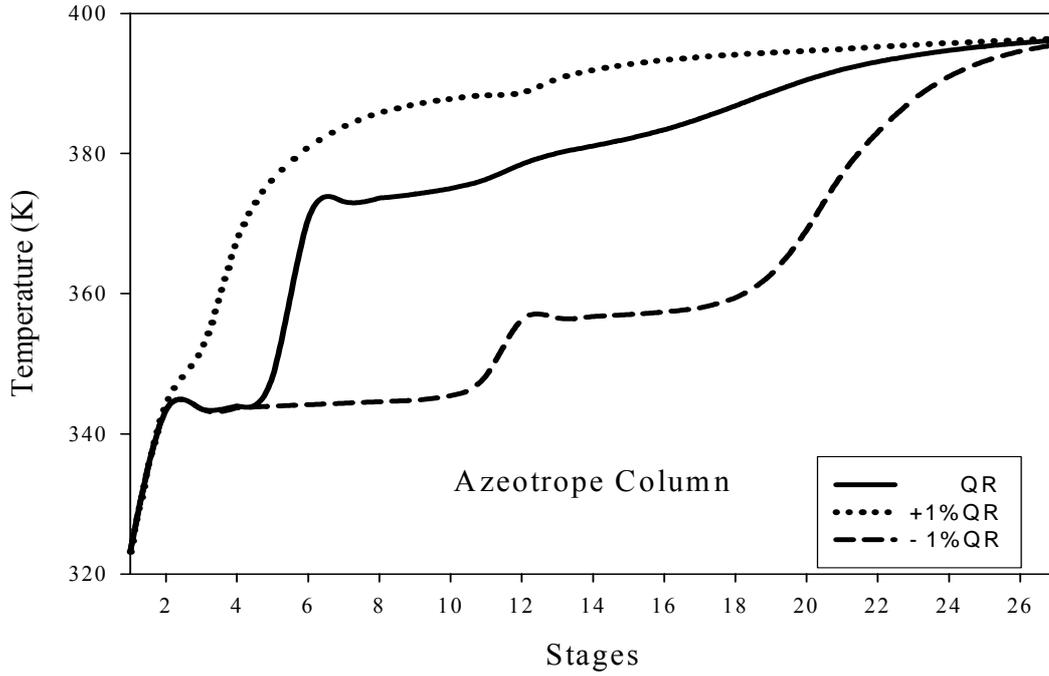


圖 5-3 共沸塔再沸器熱值改變之溫度敏感度

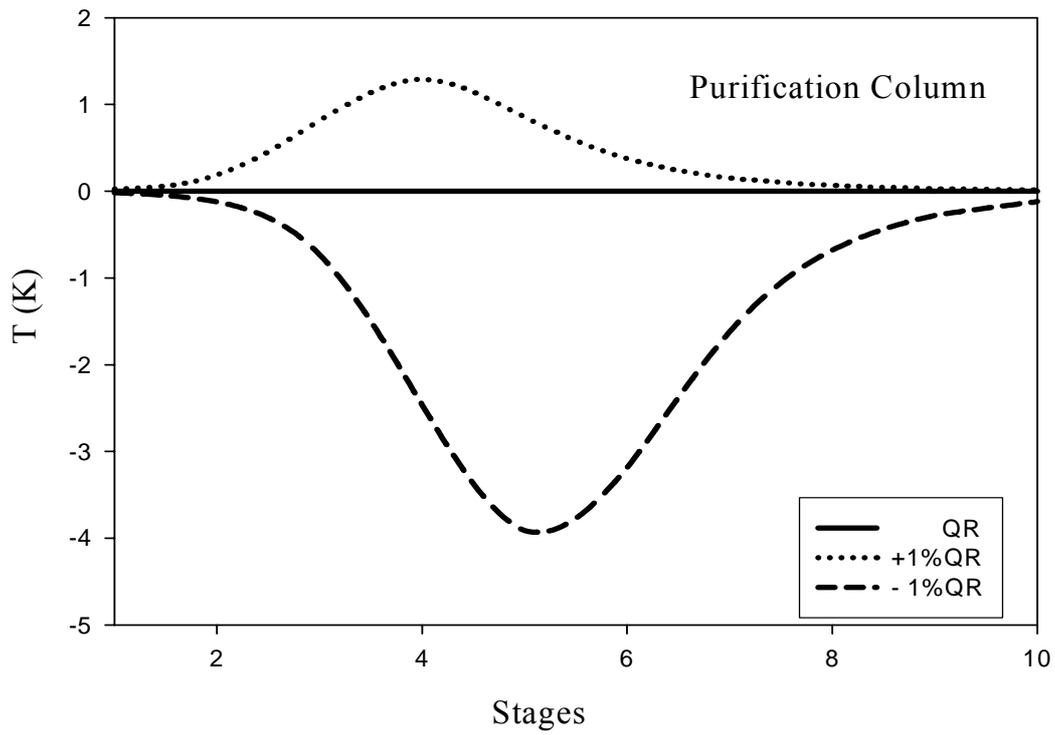
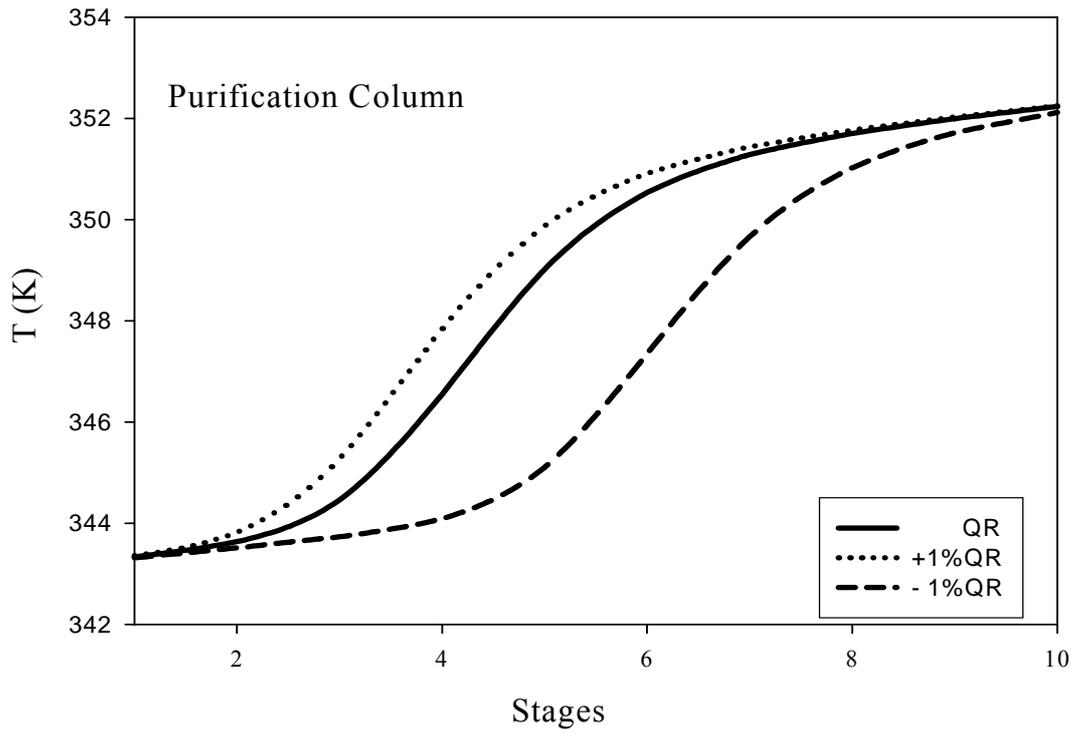


圖 5-4 純化塔再沸器熱值改變之溫度敏感度

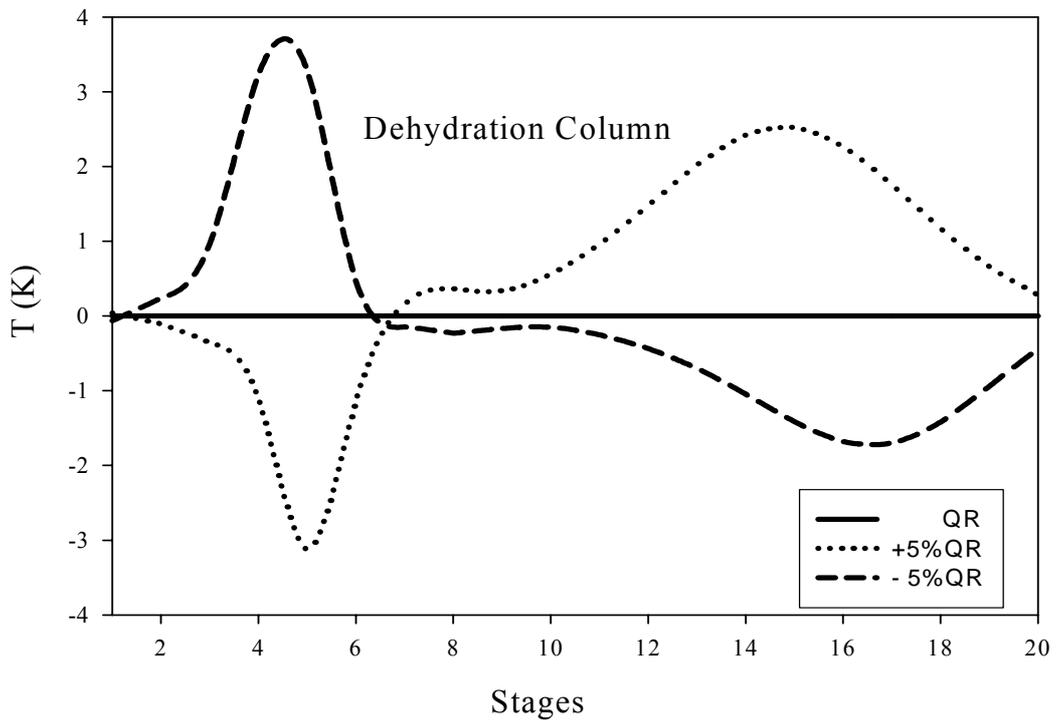
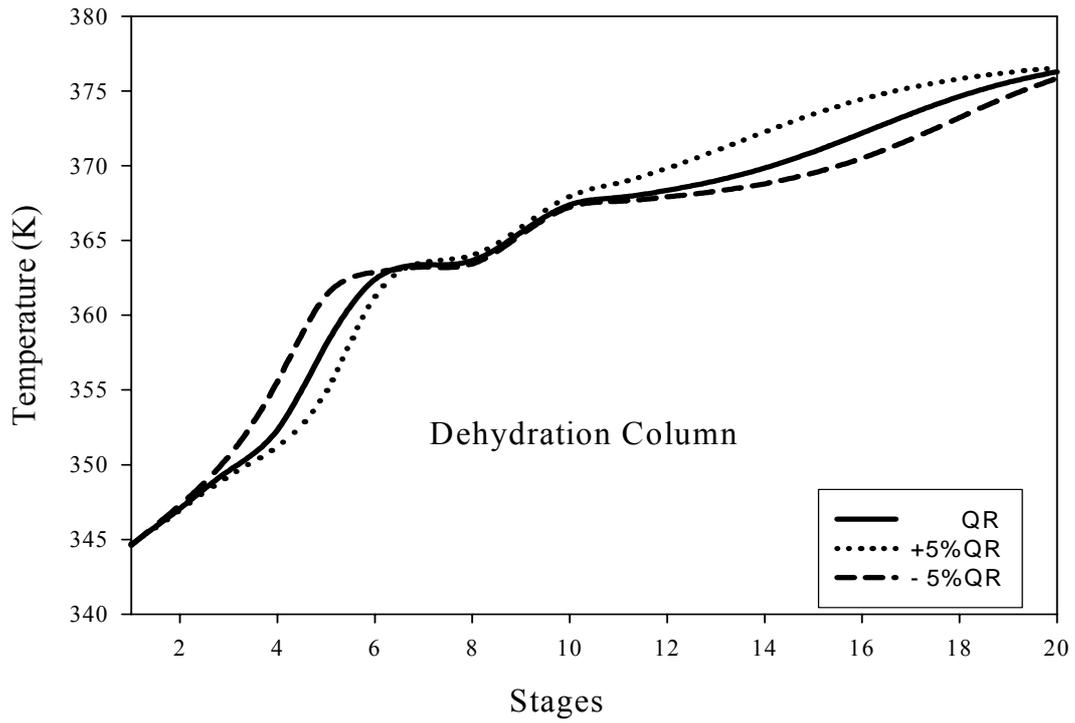


圖 5-5 除水塔再沸器熱值改變之溫度敏感度

表 5.1 整廠物流表

Stream NO.	1	2	3	4	5	6	7	8
Pressure (atm)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.17	1.00	1.20	1.01
Temperature ()	25.00	25.00	44.15	49.53	64.91	47.65	97.81	70.72
H ₂ O (m.f.)	0.05000	0.13000	0.02567	0.00502	0.00502	0.13021	0.13021	0.29990
HAc (m.f.)	0.95000	trace	0.86619	0.99497	0.99497	0.76165	0.76165	trace
EtOAc (m.f.)	trace	trace	0.00001	0.00001	0.00001	0.10455	0.10455	0.63700
EtOH (m.f.)	trace	0.87000	0.10813	trace	trace	0.00359	0.00359	0.06310
Total Flow (mol/min)	874.47	957.83	7704.97	5872.67	5872.67	7704.97	7704.97	15089.25

Stream NO.	9	10	11	12	13	14	15	16
Pressure (atm)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.17
Temperature ()	70.16	50.00	50.00	50.00	70.41	70.14	50.00	123.02
H ₂ O (m.f.)	0.29990	0.26609	0.26609	0.26609	0.28803	0.28803	0.29555	0.00502
HAc (m.f.)	trace	trace	trace	trace	trace	trace	trace	0.99497
EtOAc (m.f.)	0.63700	0.66393	0.66393	0.66393	0.63630	0.63630	0.63637	0.00001
EtOH (m.f.)	0.06310	0.06998	0.06998	0.06998	0.07567	0.07567	0.06808	trace
Total Flow (mol/min)	15089.25	24002.08	13200.00	10802.08	9979.63	9979.63	25067.96	5872.67

註：trace 代表值 $<10^{-5}$

表 5.1(續) 整廠物流表

Stream NO.	17	18	19	20	21	22	23	24
Pressure (atm)	1.00	1.20	1.17	1.01	1.00	1.00	1.00	1.13
Temperature ()	50.00	82.37	123.02	73.96	71.52	71.73	71.73	103.36
H ₂ O (m.f.)	0.95902	0.95902	0.00502	0.24566	0.24566	0.24566	0.24566	0.99962
HAc (m.f.)	trace	trace	0.99497	trace	trace	trace	trace	trace
EtOAc (m.f.)	0.01580	0.01580	0.00001	0.29766	0.29766	0.29766	0.29766	trace
EtOH (m.f.)	0.02518	0.02518	trace	0.45668	0.45668	0.45668	0.45668	0.00038
Total Flow (mol/min)	1065.89	1065.89	8371.80	106.91	106.91	50.83	56.08	1009.82

Stream NO.	25	26	27	28	29
Pressure (atm)	1.17	1.13	1.00	1.00	1.06
Temperature ()	123.02	67.92	115.75	115.75	79.01
H ₂ O (m.f.)	0.00502	0.99962	0.03666	0.01909	0.00002
HAc (m.f.)	0.99497	trace	0.92247	0.96577	trace
EtOAc (m.f.)	0.00001	trace	0.04035	0.01490	0.99903
EtOH (m.f.)	trace	0.00038	0.00052	0.00024	0.00095
Total Flow (mol/min)	2500.00	1009.82	141.35	2414.73	822.49

註：trace 代表值 $<10^{-5}$

表 5.2 各塔之結構數據

Item	Azeotrope Column	Purification Column	Dehydration Column
Theoretical stages	27	10	20
Feed stage	11 & 20&21	1	9
Reflux ratio	1.131	-	0.935
Column pressure (atm)	1	1	1
Stage pressure drop (bar)	0.007	0.007	0.007
Tray type	sieve	sieve	sieve
Column diameter (m)	2.81	2.37	0.21
Active area (m ²)	4.95	3.54	0.03
Weir length (m)	2.04	1.72	0.15
Weir height (m)	0.03	0.03	0.03

表 5.3 儀表與控制設定範圍

Sensor Name	Maximum	Normal	Minimum	Unit
Temp. of P-RD Feed (TC1)	327.0	317.3	307.0	K
Temp. of AZ Column (TC2)	404.0	394.0	384.0	K
Temp. of PF Column (TC3)	359.0	349.2	339.0	K
Temp. of DH Column (TC4)	382.0	372.2	362.0	K
QCC (PI)	0	-0.202	-0.31	MW
Q _{R1} (PID)	18.974	10.099	0	MW
Q _{R2} (PID)	12.235	6.602	0	MW
Q _{R3} (PID)	0.202	0.140	0	MW

註：PID 調諧參數均為 $K_C = 0.8(\%/%)$ ， $\tau_I = 8.0 \text{ min}$ ， $\tau_D = 0.125 \text{ min}$ 。

PI 調諧參數為 $K_C = 1.0(\%/%)$ ， $\tau_I = 2.0 \text{ min}$ 。

5.3 干擾動態測試

當完成整廠基礎控制架構後，即可探討整廠控制之可行性，此取決於加入干擾變化測試下，其整廠之控制能力是否能使產品的品質獲得維持。在本研究中，對於進料流量與進料組成的改變，均視為制程動態變化的主要原因，因此在所有的操作參數固定條件下，進行進料流量與進料組成的干擾測試。

乙醇進料流量改變之干擾

本研究之醋酸乙酯生產製程具有兩條總體進料，而醋酸進料流量則是由共沸塔之再沸器液位所調控，因此在進料流量的干擾測試中，只選擇了乙醇進料流量作為測試。在製程於穩態操作 1,000 分鐘時，分別給予+20 % (即由 957.83 mole/min 至 1149.40 mole/min)與-20 % (即由 957.83 mole/min 至 766.26 mole/min)的進料流量干擾，測試結果如圖 5-6 至 5-7 所示。

由圖 5-6 可知當乙醇進料量增加時，會使 PF 塔底產物醋酸乙酯的濃度先略微下降後再回穩至穩態時的設定點。至於 DH 塔底產物水的濃度則有微幅的上升；同時亦發現產物醋酸乙酯與水的流量皆有增加的趨勢。而當給予減少乙醇進料流量之干擾測試時，由圖 5-6 可觀察到產物醋酸乙酯濃度為先上升隨即回至穩態設定點；產物水的濃度

部分則是有極短暫的上升後漸回穩至穩定態；同時發現產物醋酸乙酯與水的產量皆有略微下降的趨勢。圖 5-7 為乙醇進料流量改變之各塔溫度分佈變化，可觀察出 AZ Column 與 DH Column 的溫度變化受乙醇進料影響較為顯著。

由以上結果可推論，當乙醇進料量增加時，醋酸乙酯濃度會有短暫的下降後回復穩定態的現象，應是受到酸醇比突然改變，轉化率瞬間微幅下降所致；而產物水部分的變化，則是推論為受進料水流量增加的影響所致。反之，當乙醇進料量減少時，醋酸乙酯濃度會有短暫的上升後回復穩定態的現象，應也是受到酸醇比改變所致。至於產物水的來源有兩個一個是進料時攜帶的水，另一個則是酯化反應產生的水，因此判定產物水的濃度先升後回穩，是由於酯化時的水與進料時的水量與穩態時的比例相近所致。在本研究中製程產物醋酸乙酯與水皆從塔底出料，而從圖 5-7 可以發現，在製程的出料位置附近的板溫度幾乎不受干擾影響，如此顯示利用本研究所設定的控制策略可以有效的使產物品質獲得維持。

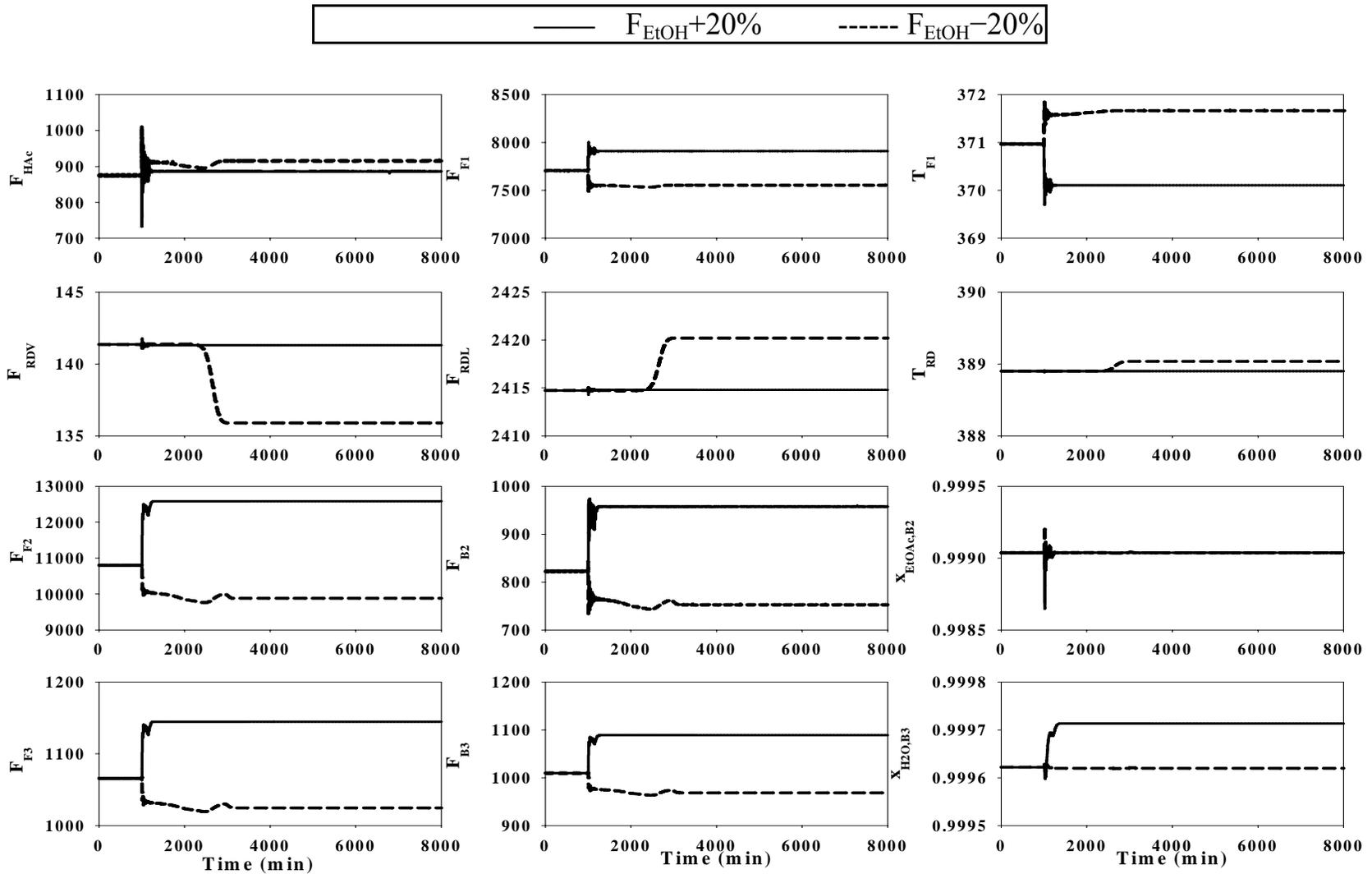


圖 5-6 乙醇進料流量改變± 20 %

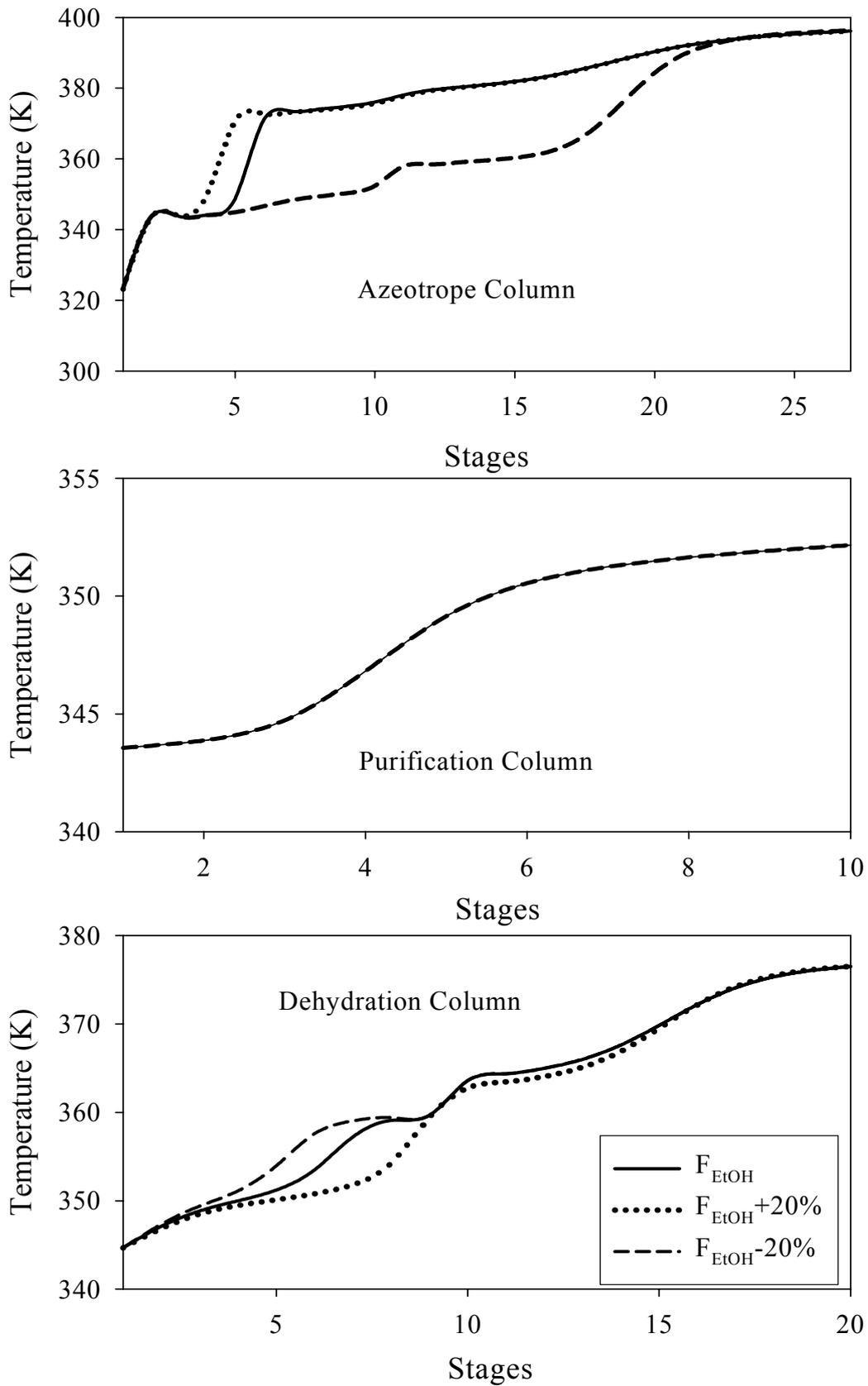


圖 5-7 乙醇進料流量改變之各塔溫度分佈變化

乙醇進料組成改變之干擾

本研究主要針對降低進料組成作干擾測試。在穩態操作下於 1,000 分鐘時，給予乙醇進料組成改變之干擾測試，由原本的 87 mole % 降低為 77 mole %，其結果如圖 5-8 至圖 5-9 所示。由圖 5-8 可觀察出 PF 之醋酸乙酯與 DH 塔底之水組成皆有微小下降幅度爾後又恢復穩態時的設定值，而兩產物的流量皆有微小的上升趨勢。另外從圖 5-9 的乙醇進料組成改變之各塔溫度分佈變化可看 AZ Column 的塔頂部分受干擾影響較為顯著。

由上述測試結果可推論，當乙醇的進料濃度下降，酸醇比上升，反應有利於向產物方向進行，轉化率上升，單位時間的產量提高，因此產物的流量有微幅上升的趨勢。又由圖 5-9 可發現，乙醇進料組成之干擾對於實行基礎控制設定之製程，於產物純度部分幾乎不構成影響。

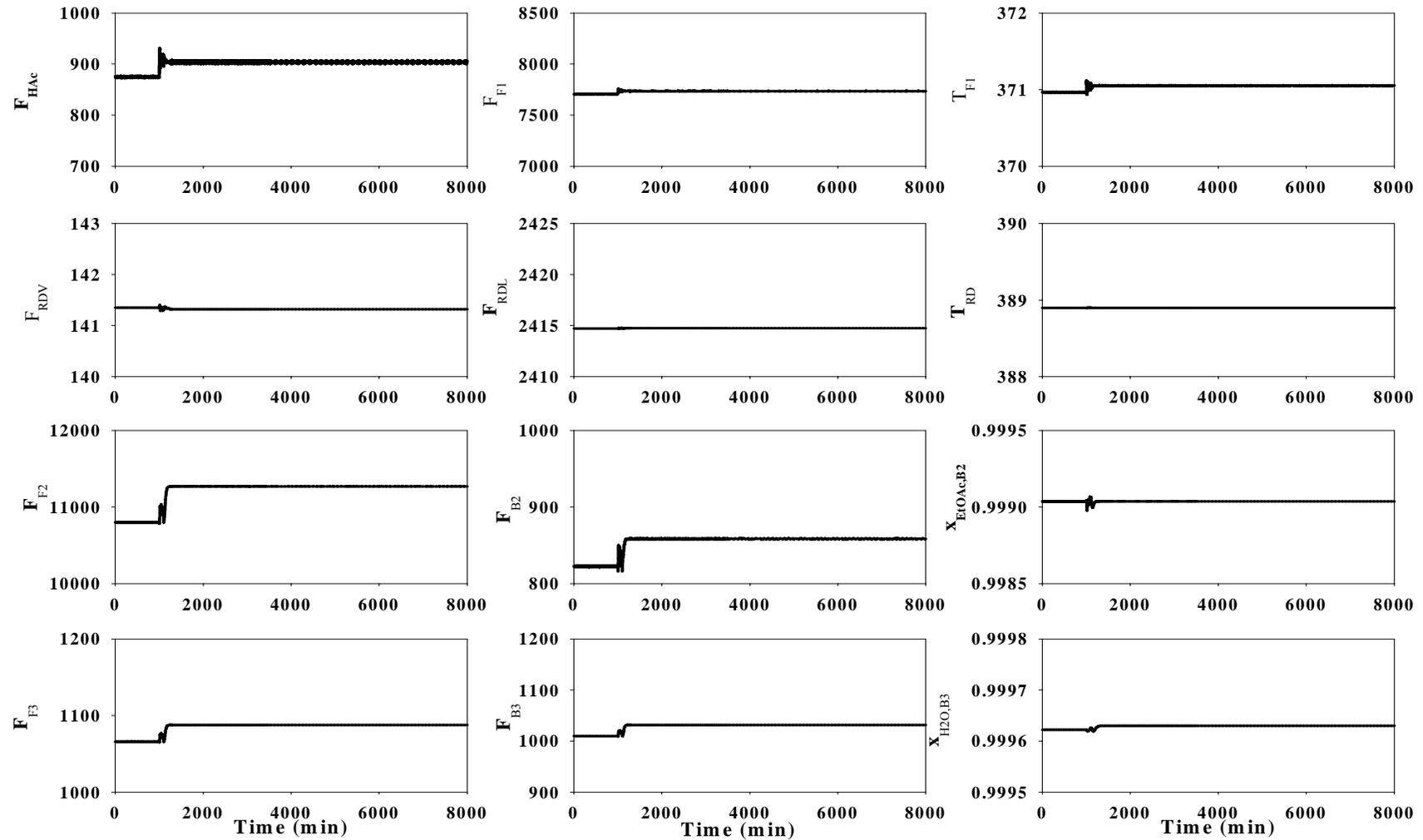


圖 5-8 乙醇進料組成改變-10%

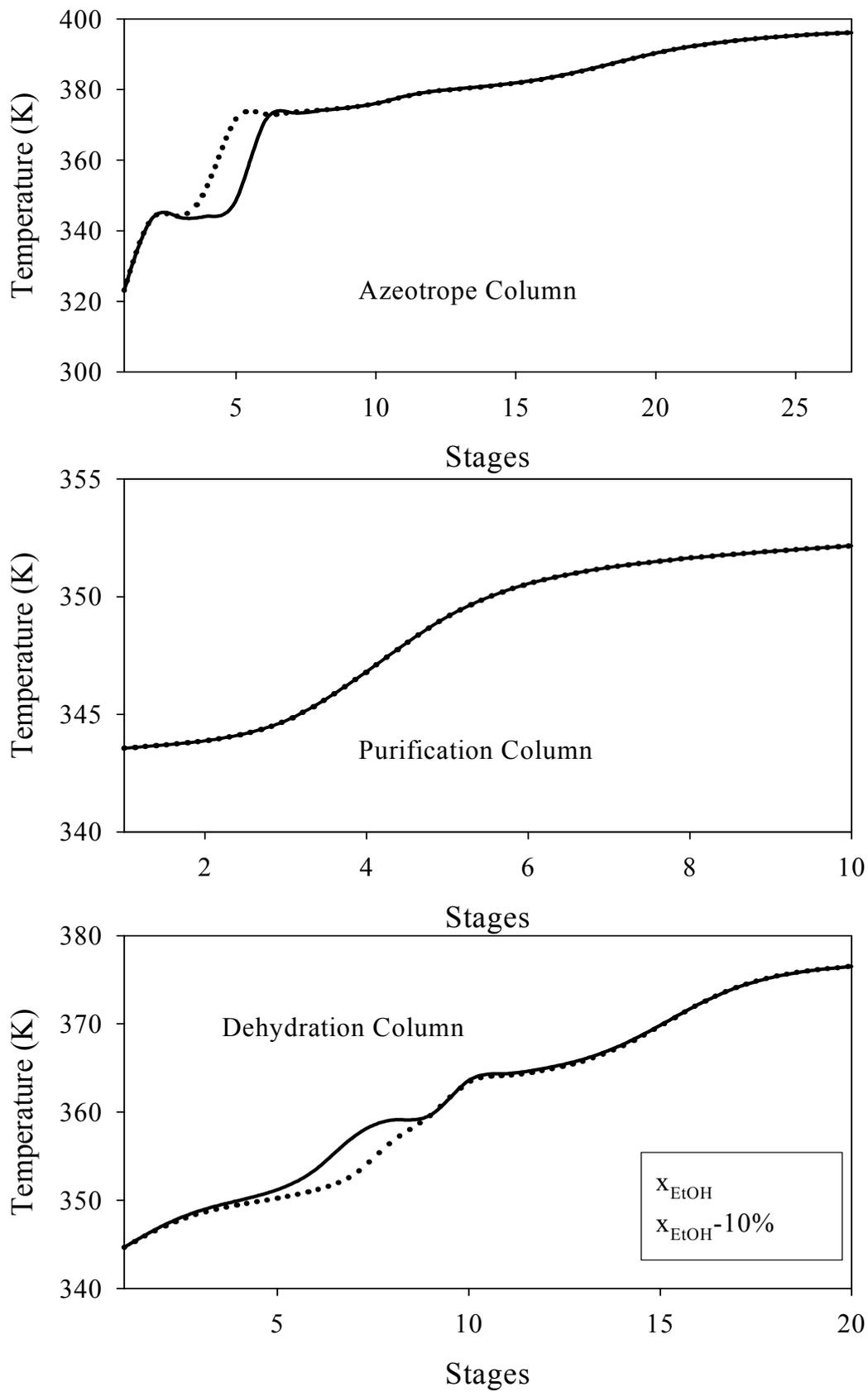


圖 5-9 乙醇進料組成改變之各塔溫度分佈變化

醋酸進料組成改變之干擾

在醋酸進料組成動態干擾測試的部分，則是在製程於穩態操作 1,000 分鐘時，分別給予-10 % (即由 95 mol % 至 85 mol %)與+ 4 % (即由 95 mol % 至 99 mol %)的進料組成干擾，測試結果如圖 5-10 至 5-11 所示。

由圖 5-10 可觀察出當醋酸進料濃度下降時，PF 塔之醋酸乙酯濃度在極短暫的下降後，隨即又恢復穩態時之設定值；DH 塔之產物水濃度則有極微小幅度的上升，而產物流量部分則皆有些許的上升。而當給予醋酸進料濃度上升之干擾時，由圖 5-10 可觀察出當醋酸進料濃度上升時，產物醋酸乙酯與水的組成僅在干擾一發生時有短暫極微小的變化，之後便回穩至穩態設定值，然而兩產物的流量則皆有些許的下降。另外由圖 5-11 醋酸進料組成改變下之各塔溫度分佈變化，可以發現 AZ 塔對於醋酸組成改變時有明顯的變化；而 DH 塔則只有靠近塔頂部分有些微的變化；PF 塔部分則是幾乎完全不受影響。

由上述結果推論，當醋酸進料組成減少時，酸醇比略微下降，因此醋酸乙酯的產物濃度有短暫的下降，爾後隨著塔底醋酸庫存減少，自動調控進料的醋酸流量，使酸醇比維持一定，產物濃度因而恢復到穩態設定值。至於產物水的部分則是因為總進料中水的濃度增加導致產物水濃度有少許上升；產物流量上升的部分則是由於醋酸進料量受

到上述干擾影響，使得進料量上升，產量也因此獲得提升。而當醋酸進料組成上升時，兩產物濃度皆有極短暫的上升後回穩的情形，亦是因為酸醇比瞬間上升所致；至於產物流量下降，則是受到 AZ 塔之醋酸庫存量所調控之醋酸進料量下降影響所致。另外，由圖 5-11 也可發現，因為在控制架構下 PF 塔及 DH 塔的塔底部分板溫幾乎不受干擾影響，所以兩產物的純度得以維持。

綜合以上所述，本研究針對此整廠基礎控制架構下，進行乙醇進料流量、兩條總進料之組成改變，探討其動態測試下對整廠控制系統之影響。以上之干擾測試，其對產物組成與流量之結果僅有些許影響，整體上而言系統仍可操作於穩定狀態。下表(表 5.4)部分為整個控制系統受到干擾後，其穩定後之產品品質表；由表 5.4 可知，其產品品質即使受到干擾的擾動影響，最終仍是可回穩至穩態設定值達到品質要求規格。

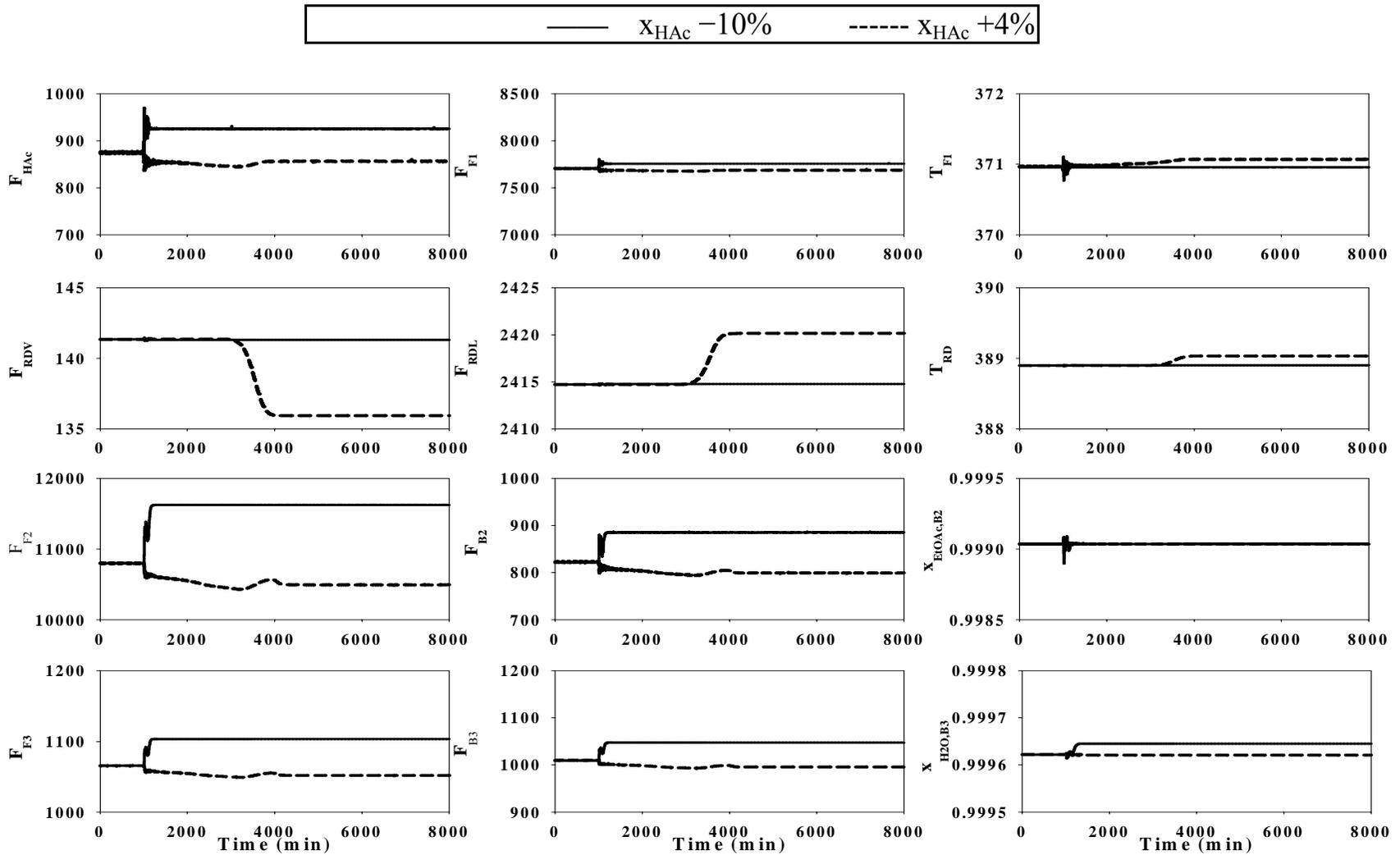


圖 5-10 醋酸進料組成改變-10%與+4%

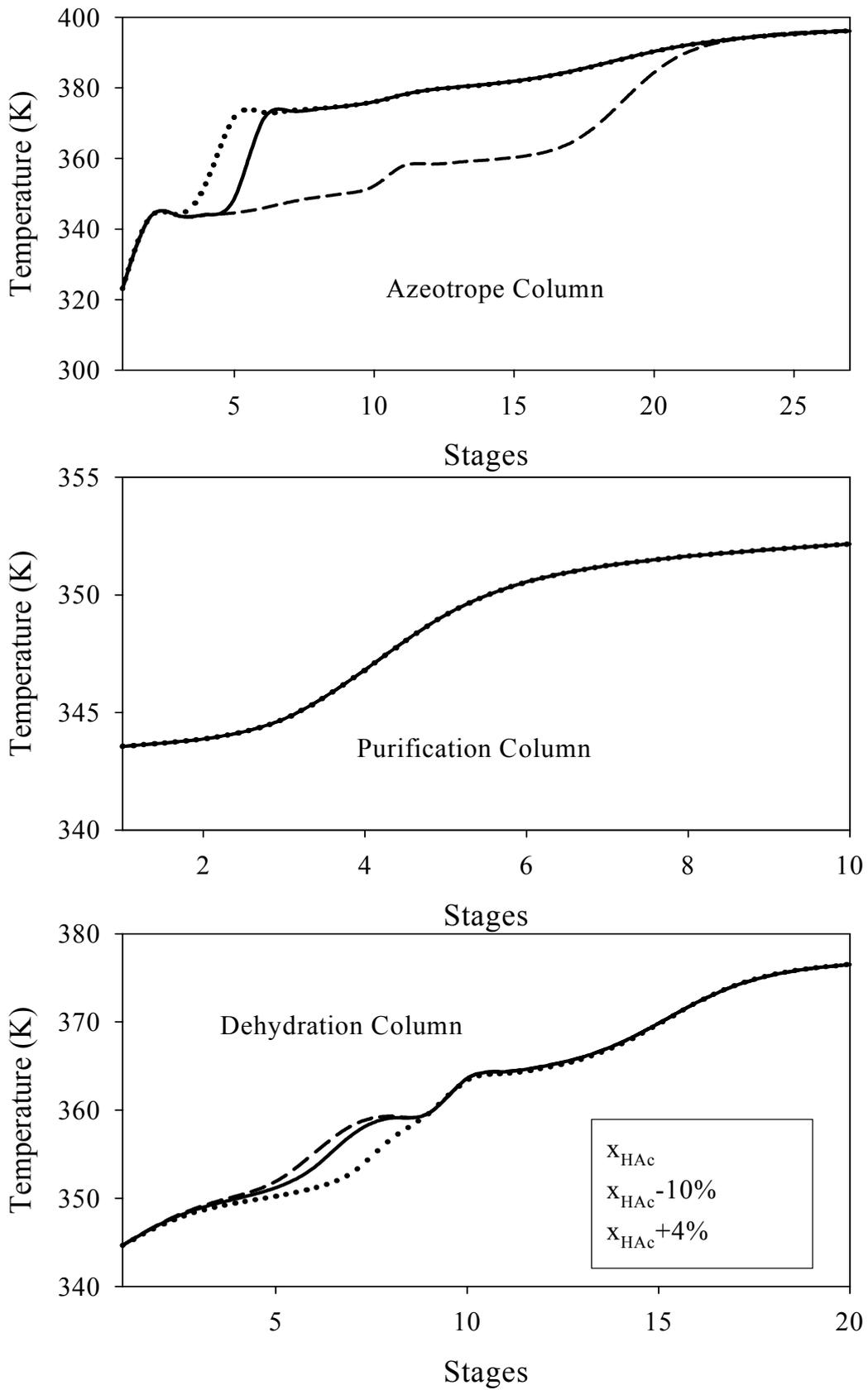


圖 5-11 醋酸進料組成改變之各塔溫度分佈變化

表 5.4 干擾變化對產品品質之影響

Case	Product molar fraction in B2					Product molar fraction in B3				
	F_{B2}	x_{H_2O}	x_{HAc}	x_{EtOAc}	x_{EtOH}	F_{B3}	x_{H_2O}	x_{HAc}	x_{EtOAc}	x_{EtOH}
Base condition	822.49	0.00002	trace	0.99903	0.00095	1009.82	0.99962	trace	trace	0.00038
$F_{EtOH} +20 \%$	957.92	0.00002	trace	0.99904	0.00094	1088.69	0.99971	trace	trace	0.00029
$F_{EtOH} -20 \%$	752.37	0.00002	trace	0.99904	0.00094	968.56	0.99962	trace	trace	0.00038
$x_{EtOH} -10 \%$	858.33	0.00002	trace	0.99904	0.00094	1031.59	0.99963	trace	trace	0.00037
$x_{HAc} -10 \%$	885.98	0.00002	trace	0.99904	0.00094	1047.48	0.99965	trace	trace	0.00036
$x_{HAc} +4 \%$	799.46	0.00002	trace	0.99904	0.00094	995.80	0.99962	trace	trace	0.00038

註： F_{B2} 、 F_{B3} 單位皆為(mol/min)。