

การศึกษาแบบจำลองเชิงพลวัต เครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด
สำหรับเปลี่ยนซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นซัลเฟอร์ไตรออกไซด์

นาย อนุรักษ์ หวานเสนาะ



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2541

ISBN 974-332-055-5

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

STUDY ON DYNAMIC MODEL OF A PACKED-BED REACTOR
FOR CONVERTING SULFUR DIOXIDE TO SULFUR TRIOXIDE

Mr. Anurak Wansanao

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering

Graduate school

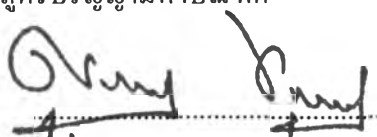
Chulalongkorn University

Academic Year 1998

ISBN 974-332-055-5

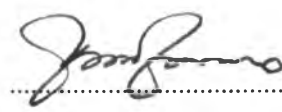
หัวข้อวิทยานิพนธ์ การศึกษาแบบจำลองเชิงพลวัต เครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด สำหรับ
เปลี่ยนซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นซัลเฟอร์ไตรออกไซด์
โดย นายอนุรักษ์ หวานเสนาะ
ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ธวัชชัย ชรินพานิชกุล

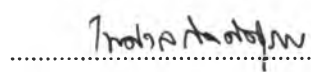
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่ง
ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต


..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย
(ศาสตราจารย์ นายแพทย์ สุภวัฒน์ ชูติวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์


..... ประธานกรรมการ
(ศาสตราจารย์ ดร.วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล)


..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ธวัชชัย ชรินพานิชกุล)


..... กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ไพศาล กิตติศุภกร)


..... กรรมการ
(ดร.สุทธิชัย อัสสะบำรุงรัตน์)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสี่เหลี่ยมนี้เพียงเล่มเดียว

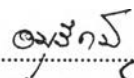
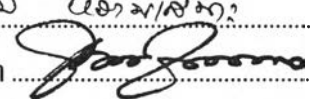
อนุรักษ์ หวานเสนาะ : การศึกษาแบบจำลองเชิงพลวัต เครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด สำหรับเปลี่ยนซัลเฟอร์ ไดออกไซด์เป็นซัลเฟอร์ ไตรออกไซด์ (STUDY ON DYNAMIC MODEL OF A PACKED-BED REACTOR FOR CONVERTING SULFUR DIOXIDE TO SULFUR TRIOXIDE) อ.ที่ปรึกษา ผศ.ดร.วัชชัย ชรินพานิชกุล , 61 หน้า, ISBN 974-332-055-5

งานวิจัยนี้ได้พัฒนาและทดสอบแบบจำลองของการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนซัลเฟอร์ไดออกไซด์เป็นซัลเฟอร์ไตรออกไซด์บนเครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบดในกระบวนการผลิตกรดกำมะถัน โดยใช้แบบจำลองมิติเดียวของสมการดุลมวลวิวิธพันธ์และสมการดุลความร้อนเอกพันธ์เทียบ ร่วมกับสมการอัตราเร็วปฏิกิริยาของ Kadlec(1972) และค่าคงที่สมดุลปฏิกิริยาของ Fogler(1986) โดยใช้วิธีการแก้สมการด้วยวิธี Finite Difference ร่วมกับวิธี Tridiagonal แล้วพัฒนาโปรแกรมคอมพิวเตอร์ เพื่อจำลองแบบผลการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์

แบบจำลองสามารถจำลองแบบช่วงภาวะพลวัต สำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด ชั้นที่ 1 โดยสามารถทำนาย จุดที่เครื่องปฏิกรณ์เข้าสู่ภาวะคงตัว ได้อุณหภูมิขาออกมีแนวโน้มต่ำกว่า 4°C และความเข้มข้นซัลเฟอร์ไดออกไซด์มีแนวโน้มสูงกว่า $0.22\% \text{SO}_2$ และสามารถทำนายอัตราการเพิ่มอุณหภูมิขาออกเฉลี่ย มีแนวโน้มต่ำกว่า 4°C/hr

และได้นำแบบจำลองนี้ จำนวนทดสอบหาเงื่อนไขที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์ 3 ปัจจัย คือ เมื่อทดสอบเปลี่ยนอุณหภูมิจาก 400°C ถึง 450°C จะให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดที่ 450°C เมื่อทดสอบเปลี่ยนความเข้มข้นซัลเฟอร์ไดออกไซด์จาก $9.5\% \text{SO}_2$ ถึง $11.5\% \text{SO}_2$ จะให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดที่ $11.5\% \text{SO}_2$ และเมื่อทดสอบเปลี่ยนอัตราการป้อนจาก $4500 \text{ Nm}^3/\text{hr}$ ถึง $6500 \text{ Nm}^3/\text{hr}$ จะให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดที่ $4500 \text{ Nm}^3/\text{hr}$

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2541

ลายมือชื่อนิสิต 
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา 
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

#C817425 : MAJOR CHEMICALS ENGINEER
KEY WORD: PACKED BED REACTOR/DYNAMIC MODEL/ SULFURDIOXIDE
ANURAK WANSANAO : STUDY ON DYNAMIC MODEL OF A
PACKED-BED REACTOR FOR CONVERTING SULFUR DIOXIDE TO
SULFUR TRIOXIDE THESIS ADVISOR : ASSIST. PROF.
THAWATCHAI CHARINPANICHKUL, Ph.D. 61pp.
ISBN 974-332-055-5

In this work, development of a model of a reaction for converting sulfur dioxide to sulfur trioxide in a packed bed reactor was carried out and the model was verified using actual data taken from a sulfuric acid producing plant. One-dimension heterogeneous mass balance and pseudo-homogenous heat balance with kinetic rate of reaction proposed by Kadlec(1972) as well as equilibrium constant presented by Fogler(1986) was taken into consideration and was solved using finite difference technique. The computer software based on the model studied then was developed and verified its performance before taken to simulate the actual process.

Based on simulation results, it was found that the bed temperature predicted by the model was 4°C lower than those of actual measuring results, meanwhile the predicted concentration of SO₂ was 0.22 % higher than measurement.

Simulation was carried out in the three difference conditions, namely varying feed temperature, feed concentration and feed flow rate. It was found that in the range of feed temperature between 400°C and 450°C, the rate of reaction became maximum at the feed rate of 450°C, in the range of feed concentration between 9.5%SO₂ and 11.5%SO₂, the rate of reaction became maximum at the feed rate of 11.5%SO₂ and in the range of feed flow rate between 4500 Nm³/hr and 6500 Nm³/hr, the rate of reaction became maximum at the feed flow rate was 4500 Nm³/hr.

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี.....

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี.....

ปีการศึกษา 2541.....

ลายมือชื่อนิสิต *อนันต์ เวช/สท.*.....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา *Thawatchai Charinpanichkul*.....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....

กิตติกรรมประกาศ



วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ ด้วยความช่วยเหลือจากหลายฝ่าย ขอขอบพระคุณอย่างสูง ต่อ ผศ.ดร.ธวัชชัย ชรินพานิชกุล ที่ได้ให้คำปรึกษาแนะแนวทางแก้ไขปัญหา และให้ข้อคิดเห็นต่างๆ ที่เป็นประโยชน์อย่างยิ่ง ตลอดจนตรวจทานแก้ไขวิทยานิพนธ์ จนสำเร็จ และขอขอบคุณ บริษัท ทัท่าไทย จำกัด ซึ่งเอื้อเฟื้อข้อมูลในการทำการวิจัย ครั้งนี้

สุดท้ายนี้ ขอกราบขอบพระคุณคุณพ่อ คุณแม่ และ คุณวัชรီ หวานเสนาะ ที่สนับสนุนทั้ง กำลังกายและกำลังใจ ให้งานวิจัยสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความเรียบร้อย

สารบัญ

บทคัดย่อภาษาไทย	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	จ
กิตติกรรมประกาศ	ฉ
สารบัญตาราง	ณ
สารบัญรูป.....	ญ
สารบัญสัญลักษณ์	ฎ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 มูลเหตุจูงใจ	1
1.2 วัตถุประสงค์	2
1.3 ขอบเขตการวิจัย	2
1.4 สภาวะของอุตสาหกรรมกรดกำมะถันในประเทศไทย	2
บทที่ 2 ผลงานวิจัยในอดีต	6
บทที่ 3 ปฏิกริยา และเครื่องปฏิกรณ์	9
3.1 กระบวนการผลิตกรดกำมะถัน	9
3.2 ลักษณะเฉพาะปฏิกริยาออกซิเดชันของ SO ₂	9
3.3 เครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด	11
บทที่ 4 แบบจำลองกระบวนการผลิต	21
4.1 แบบจำลอง	21
4.2 แก๊สมการด้วยวิธี Finite Difference	26
4.3 ลำดับการทำงานของโปรแกรมคอมพิวเตอร์.....	28
บทที่ 5 การทดสอบแบบจำลอง เงื่อนไขและผลการจำลอง	32
5.1 โรงงานผลิตกรด ที่ใช้ในการศึกษาและทดสอบแบบจำลอง	32
5.2 วิธีการเก็บข้อมูล	33
5.3 ผลการเก็บข้อมูล	34
5.4 การตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลอง	35
5.5 การศึกษาจำลองแบบการปฏิบัติงานที่สภาวะต่างๆ.....	37
บทที่ 6 บทสรุปและข้อเสนอแนะ	46

รายการอ้างอิง.....48

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก. ที่มา parameters ที่ใช้ในการจำลอง49

ภาคผนวก ข. วิธีการแก้ชุดสมการด้วยวิธี Tridiagonal52

ภาคผนวก ค. วิธีการวิเคราะห์หาปริมาณ SO_2 ในก๊าซ53

ภาคผนวก ง. ตัวอย่างการคำนวณ59

ประวัติผู้วิจัย.....61

สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
1-1	ปริมาณความต้องการใช้กรดกำมะถันของประเทศไทยระหว่าง ปี พ.ศ.2538- พ.ศ.2552	3
1-2	รายชื่อผู้ผลิตกรดกำมะถันเข้มข้นที่สำคัญ และกำลังการผลิต	5
3-1	ประเภทเครื่องปฏิกรณ์แบบแพคเบด	11
5-1	ข้อมูลการทำงานเครื่องปฏิกรณ์ ช่วงภาวะคงตัว	34
5-2	การเปรียบเทียบค่าจากการเก็บข้อมูลและค่าจากการคำนวณในกรณี ยังไม่ได้รวมพจน์ความต้านทานการแพร่ผ่านชั้นฟิล์ม	35
5-3	การเปรียบเทียบค่าจากการเก็บข้อมูลและค่าจากการคำนวณในกรณี รวมพจน์ความต้านทานการแพร่ผ่านชั้นฟิล์ม	36
5-4	เปรียบเทียบการคำนวณผลการทำงานขณะอยู่ในสภาวะคงตัวของเครื่อง ปฏิกรณ์เมื่อเปลี่ยนอุณหภูมิสายป้อน.....	37
5-5	เปรียบเทียบผลการทำงานขณะอยู่ในสภาวะคงตัวของเครื่องปฏิกรณ์เมื่อเปลี่ยน ความเข้มข้นซัลเฟอร์ไดออกไซด์ของสายป้อน	38
5-6	เปรียบเทียบผลการทำงานขณะอยู่ในสภาวะคงตัวของเครื่องปฏิกรณ์เมื่อเปลี่ยน อัตราการป้อนของสายป้อน	39

สารบัญรูป

รูปที่		หน้า
3-1	การเปลี่ยนแปลงของการเกิดปฏิกิริยาของสารตั้งต้นที่จุดสมดุล (equilibrium conversion) X เทียบกับอุณหภูมิ T	10
3-2	แสดงการเกิดปฏิกิริยาที่เพิ่มขึ้นเนื่องจากการถ่ายเทความร้อนออกกระหว่าง.. ชั้นของปฏิกิริยา	10
3-3	แสดงขั้นตอนการแพร่ของสารตั้งต้น จากกระแสน้ำไหล เข้าสู่ผิวตัวเร่งปฏิกิริยา....	12
3-4	แสดงขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยา โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยา แบบ Heterogenous	13
3-5	แสดงให้เห็นชั้นฟิล์มที่อยู่รอบตัวเร่งปฏิกิริยา	13
3-6	แสดง concentration profile บนชั้นฟิล์ม.....	14
3-7	แสดง shell balance บนตัวเร่งปฏิกิริยา	17
3-8	แสดงค่า η ของรูปทรงต่าง ๆ และสำหรับสมการอัตราเร็วปฏิกิริยาอื่นๆ.....	20
4-1	แสดงผังการทำงาน ของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ แบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ส่วนโปรแกรมหลัก.....	30
4-2	แสดงผังการทำงาน ของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ แบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ส่วนโปรแกรมย่อย	31
5-1	ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์	32
5-2	รูปร่างตัวเร่งปฏิกิริยา.....	33
5-3	อุณหภูมิ ขาออกชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา ขณะเครื่องปฏิกรณ์ทำงานในช่วงภาวะพลวัต	35
5-4	เปรียบเทียบการทำงานเครื่องปฏิกรณ์ ในช่วงพลวัต ค่าจากการเก็บข้อมูลและค่า จากการคำนวณในกรณีรวมพจน์ความต้านทานการแพร่ผ่านชั้นฟิล์ม.....	36
5-5 a	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับอุณหภูมิขาออกของเครื่องปฏิกรณ์ของ ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนอุณหภูมิสายป้อน	43
5-5 b	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับความเข้มข้น SO_2 ขาออกของเครื่อง ปฏิกรณ์ ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนอุณหภูมิสายป้อน.....	43
5-6 a	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับอุณหภูมิขาออกของเครื่องปฏิกรณ์ ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนความเข้มข้นซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	44
5-6 b	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับความเข้มข้น SO_2 ของเครื่องปฏิกรณ์ ของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนความเข้มข้นซัลเฟอร์ไดออกไซด์.....	44

5-7 a	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับอุณหภูมิขาออกของเครื่องปฏิกรณ์ ชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนอัตราการป้อน.....	45
5-7 b	การเปรียบเทียบ ผลการทำงานสำหรับความเข้มข้น SO_2 ของเครื่องปฏิกรณ์ ของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยาที่ 1 เมื่อเปลี่ยนอัตราการป้อน.....	45

สารบัญสัญลักษณ์

สัญลักษณ์

a	พื้นที่ผิวภายนอกต่อปริมาตรชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (m^{-1})
$c_{p,g}$	ค่าความจุความร้อนต่อ โมลของก๊าซ ($J/mol.K$)
$c_{p,s}$	ค่าความจุความร้อนต่อน้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยา ($J/kg.K$)
C	ความเข้มข้นเชิงโมลรวมของก๊าซ (mol/m^3)
d_p	ขนาดตัวเร่งปฏิกิริยา (m)
D_{eff,SO_2}	การแพร่ของก๊าซ SO_2 ภายในช่องว่างตัวเร่งปฏิกิริยา (m^2/s)
h	สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน($J/m^2.s.K$)
h_s	ค่าโมดูลัส ซีล (Thiele modulus) (dimensionless)
j_H	Colburn j-factor สำหรับการถ่ายเทความร้อน(dimensionless)
j_m	Colburn j-factor สำหรับการถ่ายเทมวล(dimensionless)
k_c	สัมประสิทธิ์การถ่ายเทมวล(m/s)
k_{kin}	ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยา ($mol/kgcat.h$)
K_p	ค่าคงที่สมดุลปฏิกิริยา ($kPa^{-1/2}$)
Nu	Nusselt Number(dimensionless)
P	ความดันรวม (kPa)
Pr	Prandlt Number(dimensionless)
Q	heat flux($J/m^2.s$)
r_{kin}	อัตราการเกิดปฏิกิริยา ($mol/kg.h$)
R_{gas}	ค่าคงที่ก๊าซ ($J/mol.K$)
Re	Reynolds Number(dimensionless)
Sc	Schmidt Number(dimensionless)
Sh	Sheerwood Number(dimensionless)
St	Stanton Number(dimensionless)
t	เวลา (s)
T	อุณหภูมิ (K)
u_s	Superficial velocity (m/s)
V_g	อัตราส่วนช่องว่างต่อน้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยา (m^3/kg)

V_0	ปริมาตรต่อโมลที่สภาวะมาตรฐาน (m^3/mol)
W	mass flux($\text{mol}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$)
y_i	อัตราส่วนโมลของสาร i (dimensionless)
Z	ระยะทางตามแนวแกนเครื่องปฏิกรณ์ (m)

สัญลักษณ์ภาษากรีก

ΔH	ค่าความร้อนแฝงของการเกิดปฏิกิริยา (J/mol)
ε_b	อัตราส่วนปริมาตรช่องว่างของชั้นตัวเร่งปฏิกิริยา (dimensionless)
ε_p	อัตราส่วนปริมาตรช่องว่างของตัวเร่งปฏิกิริยา (dimensionless)
η	effectiveness factor (dimensionless)
ν_i	stoichiometric coefficient (dimensionless)
ρ_g	ความหนาแน่นของก๊าซ (kg/m^3)
ρ_s	ความหนาแน่นของตัวเร่งปฏิกิริยา (kg/m^3)
ψ	pellet shape factor(dimensionless)
λ	conductivity(J/cm.s.K)
μ	ความหนืด(kg/m.s)

สัญลักษณ์ตัวห้อย

b	bulk
f	สถานะ ณ จุดป้อน
p	สถานะที่ตัวเร่งปฏิกิริยา
s	สถานะที่ผิวตัวเร่งปฏิกิริยา