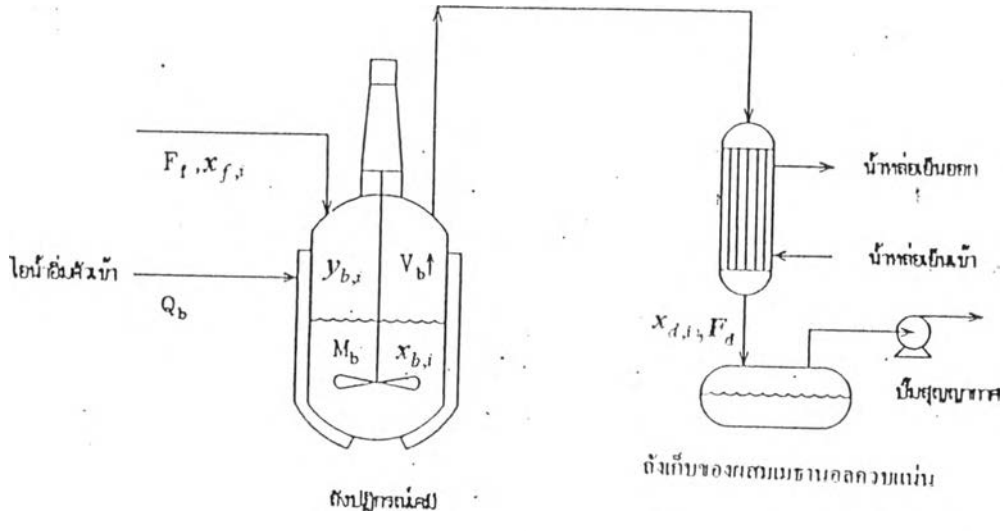
บทที่ 3

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการหาคำตอบของแบบจำลองของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์

3.1 แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่นแบบแบตช์ในระบบของ น้ำ เมทานอล ไกลออกซอลเรซิน และฟอร์มาลดีไฮด์

ในกระบวนการผลิตของผสมไกลออกซอลเรซินเมื่อสิ้นสุดปฏิกริยาเคมีจะได้ของผสมที่ประกอบด้วย น้ำ (T_b = 373.15 เคลวิน) เมทานอล (T_b = 337.90 เคลวิน) ไกลออกซอลเรซิน (T_b = 699.49 เคลวิน) และฟอร์มาลดีไฮด์ (T_b = 254.10 เคลวิน)ในขั้นตอนสุดท้ายของกระบวนการผลิตจะกลั่นแยกเมทานอลซึ่งเป็นตัวทำละลายออก โดยกลั่นที่สภาวะความดันอยู่ในช่วงระหว่าง 0.2-0.3 บรรยากาศ ซึ่งแสดงดังรูปที่ 3.1



3.1 แสดงอุปกรณ์ที่ใช้ในระบบการผลิตโดยเครื่องปฏิกรณ์เคมี ห้องน้ำที่เป็นเครื่องกลั่นแยกเสร็จสิ้นปฏิกริยาเคมี

กระบวนการกลั่นพิจารณาภายใต้สมมุติฐานดังนี้

1. ระบบดำเนินการแบบไม่คงตัว

2. ไม่มีการไหลกลับของไอควบแน่น

3. ระบบเป็นการผสมอย่างสมบูรณ์

4. ระบบอยู่ที่สมดุลระหว่างไอกับของเหลวตลอดเวลา

5. เครื่องควบแน่นสามารถควบแน่นไอได้ทั้งหมด

6. ไม่มีการสะสมในเครื่องควบแน่น

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของระบบดังกล่าวสร้างขึ้นจาก สมการอนุรักษ์มวลรวม สมการอนุรักษ์มวลย่อย รอบถังปฏิกรณ์เคมีและเครื่องควบแน่น และสมการอนุรักษ์พลังงานรอบถังปฏิกรณ์เคมี

พิจารณาที่ระบบใดระบบหนึ่ง สมการอนุรักษ์มวลรวม สมการอนุรักษ์มวลย่อย เขียนอยู่ในรูปทั่วไปได้ดังสมการ (46)

อัตราการสะสมมวลหรือมวลย่อยของระบบ = อัตราการไหลของมวลหรือมวลย่อยไหลเข้าสู่ระบบ - อัตราการไหลของมวลหรือมวลย่อยไหลออกจากระบบ + อัตราการผลิตขึ้นใหม่ของมวลหรือมวลย่อย (46)

และสมการอนุรักษ์พลังงานแสดงได้ดังนี้

อัตราการสะสมพลังงานของระบบ = อัตราการพาพลังงานเข้าสู่ระบบ - อัตราการพาพลังงานออกจากระบบ + อัตราการให้พลังงานความร้อน - อัตราการทำงานของระบบ (47)

1) สมการอนุรักษ์มวลรวมรอบถังปฏิกรณ์เคมี

จากสมการ (46)

$$\frac{dM_b}{dt} = F_f - V_b \tag{48}$$

2) สมการอนุรักษ์มวลย่อยรอบถังปฏิกรณ์เคมี

$$\frac{d(M_b x_{b,j})}{dt} = F_f x_{f,j} - V_b y_{b,j}$$

$$x_{b,j}\frac{dM_b}{dt} + M_b\frac{dx_{b,j}}{dt} = F_f x_{f,j} - V_b y_{b,j} \tag{49}$$

แทนค่าสมการ (48) ลงในสมการ (49)

$$\frac{dx_{b,j}}{dt} = \frac{1}{M_b}\left[F_f(x_{f,j} - x_{b,j}) - V_b(y_{b,j} - x_{b,j})\right] \tag{50}$$

3) สมการอนุรักษ์พลังงานรอบถังปฏิกรณ์เคมี

เนื่องจากระบบไม่ขยายตัวดังนั้น จากสมการ (47)

$$\frac{d(H_b^L M_b)}{dt} = F_f H_f^L - V_b H_b^V + Q_b$$

$$H_b^L\frac{dM_b}{dt} + M_b\frac{dH_b^L}{dt} = F_f H_f^L - V_b H_b^V + Q_b \tag{51}$$

แทนค่าสมการ (48) ลงในสมการ (51) ได้

$$V_b = \frac{1}{(H_b^V - H_b^L)}\left[F_f(H_f^L - H_b^L) - M_b\frac{dH_b^L}{dt} + Q_b\right] \tag{52}$$

และเนื่องจากอุณหภูมิของระบบมีการเปลี่ยนแปลงน้อย การเปลี่ยนแปลงเอนทัลปีของวัฏภาคของเหลวมีค่าน้อยมากดังนั้นสมการ (52) ลดรูปได้

$$V_b = \frac{1}{(H_b^V - H_b^L)}\left[F_f(H_f^L - H_b^L) + Q_b\right] \tag{53}$$

$$Q_b = U_b A_b (T_j - T) \tag{54}$$

4) สมการการอนุรักษ์มวลรวมรอบเครื่องควบแน่น

เนื่องจากไอควบแน่นแบบได้ทั้งหมด และไม่มีการสะสมในเครื่องควบแน่นดังกล่าว ดังนั้นจากสมการ (46)ได้

$$V_b = F_d \tag{55}$$

5) สมการอนุรักษ์มวลย่อยรวมเครื่องควบแน่น

$$y_{b,i} V_b = x_{d,i} F_d \tag{56}$$

แทนค่าสมการ (55) ลงในสมการ (56)

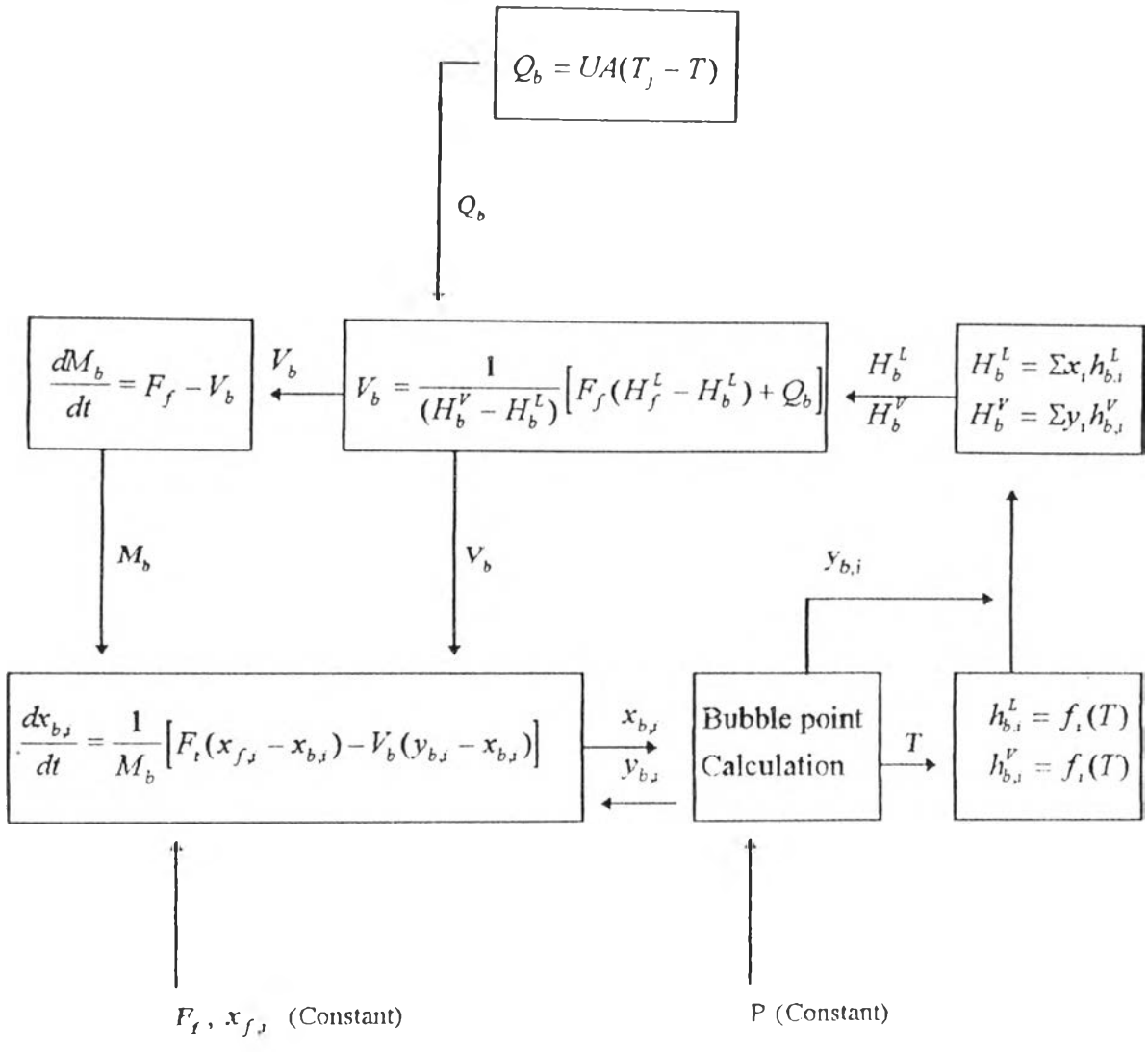
$$y_{b,i} = x_{d,i} \tag{57}$$

จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่น การหาค่าอัตราการเปลี่ยนแปลงโมลรวมของระบบจะหาได้จากสมการ (48) และการหาค่าอัตราการเปลี่ยนแปลงของเศษส่วนโมลย่อยในวัฏภาคของของเหลวหาได้จากสมการ (50) สำหรับอัตราการระเหยสามารถหาได้จากสมการ (53) ค่าพลังงานความร้อนที่ระบบได้รับหาได้จากสมการ (54) เทอม "UA" ในสมการ (54) ประเมินจากข้อมูลที่ได้จากปฏิบัติการกลั่น ซึ่งได้แสดงการคำนวณในภาคผนวก ข. สำหรับค่าเศษส่วนโมลในวัฏภาคไอ สามารถหาได้จากแบบจำลองของ สมดุลไอ-ของเหลว ในหัวข้อที่ (2.1) และเศษส่วนโมลของของเหลวที่ได้จากไอควบแน่นสามารถหาได้จากสมการ (57)

3.2 การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ และการอินทิเกรทเชิงตัวเลข

3.2.1 การหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

ในการหาคำตอบของแบบจำลองพิจารณาที่สภาวะระบบเข้าสู่สมดุล หรือสภาวะที่ของผสมเริ่มเดือด ไม่พิจารณาสภาวะเริ่มปฏิบัติการ หรือช่วงที่เริ่มให้คุณหภูมิถึงปฏิกรณ์เคมี จากอุณหภูมิบรรยากาศถึงอุณหภูมิของของผสมเริ่มเดือด และกำหนดให้ค่าความดันของระบบคงที่ตลอดการทดลอง การทำนายความเข้มข้นของวัฏภาคไอที่แปรเปลี่ยนตามเวลาสามารถคำนวณได้ตามขั้นตอนต่าง ๆ ที่ได้แสดงไว้ในรูปที่ 3.2



รูปที่ 3.2 แสดงอัลกอริธึมของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของกระบวนการกลั่น

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

จากรูปที่ 3.2 การคำนวณสามารถแบ่งเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

1. การคำนวณจุดเริ่มกลายเป็นไอ (Bubble point)

เมื่อเริ่มต้นกลั่นความเข้มข้นในวัฏภาคไอและคุณสมบัติของระบบ สามารถพิจารณาได้จากสภาวะเริ่มต้นของระบบกล่าวคือ ความดันของระบบและความเข้มข้นในวัฏภาคของของเหลวดังที่ได้แสดงไว้ในรูป 3.3

Read P, $\{x_i\}$, Constsnt

Calc. $\{T_i^{sat}\}$ by Eq. (58)

$$T_i^{sat} = \frac{\Delta H_{Vb,i}(T_{b,i} - C_{2,i})^2}{\Delta H_{Vb,i}(T_{b,i} - C_{2,i}) - 1.91866T_{b,i}^2 \ln P} + C_{2,i} \qquad (58)$$

Calc. $T = \sum x_i T_i^{sat}$ (59)

Evaluated P_i^{VP} by Eq. (60)

$$\ln P_i^{VP} = \frac{\Delta H_{Vb,i}(T_{b,i} - C_{2,i})^2}{1.91866T_{b,i}^2}\left[\frac{1}{(T_{b,i} - C_{2,i})} - \frac{1}{(T - C_{2,i})}\right] \qquad (60)$$

Evaluated γ_i by Subprogram Calc. γ_i

Indentify Species k (k = i = 1)

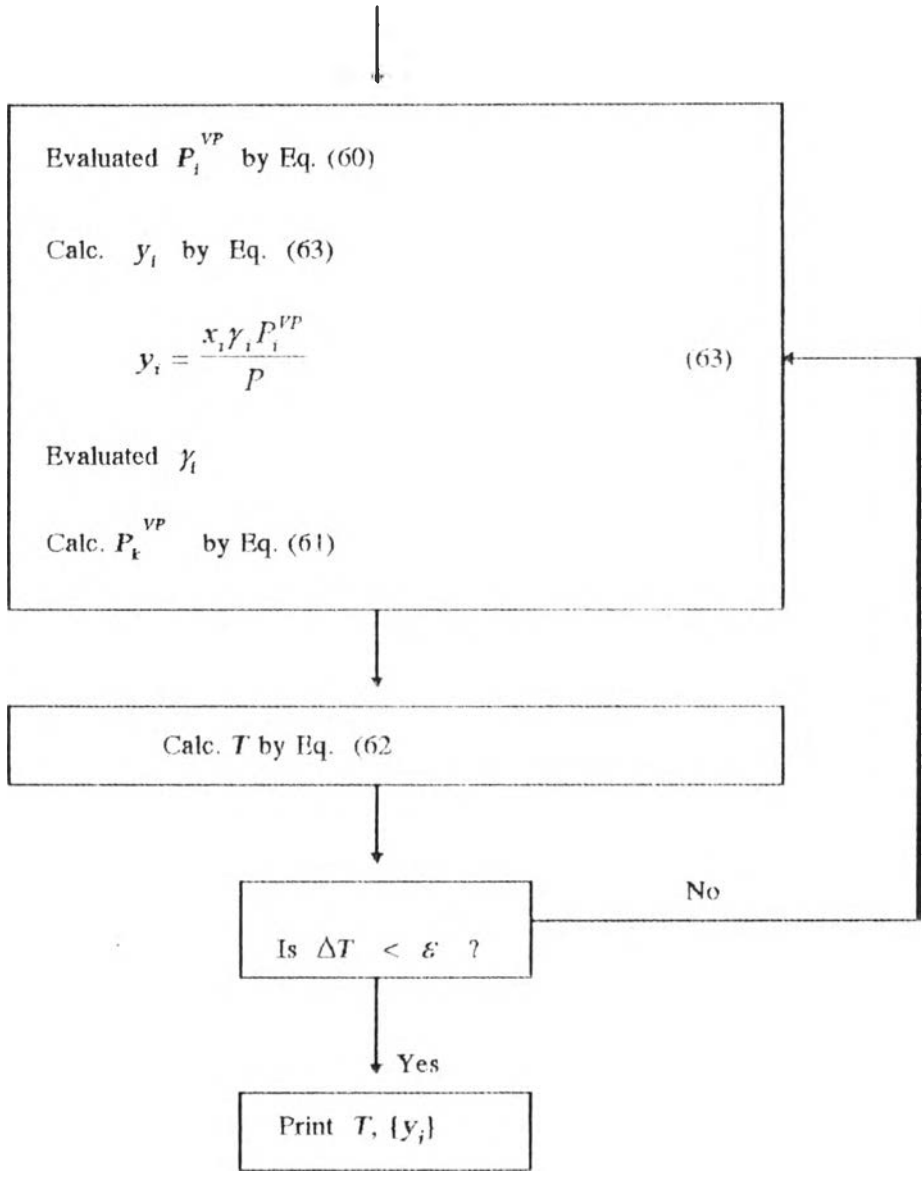
Calc. P_k^{VP} by Eq. (61)

$$P_k^{VP} = \frac{P}{\sum_i (x_i \gamma_i)\left(\frac{P_i^{VP}}{P_k^{VP}}\right)} \qquad (61)$$

Calc. T by Eq. (62)

$$T = \frac{\Delta H_{Vb,k}(T_{b,k} - C_{2,k})^2}{\Delta H_{Vb,k}(T_{b,k} - C_{2,k}) - 1.91866T_{b,k}^2 \ln P_k^{VP}} + C_{2,k} \qquad (62)$$

I17262641



รูปที่ 3.3 แสดงผังงานการคำนวณจุดบับเบิล

2. คำนวณหาค่าเอนทัลปี

จากค่าอุณหภูมิและความเข้มข้นในวัฏภาคไอที่ทราบจากการคำนวณในขั้นตอนที่ 1 นำไปคำนวณหาค่าเอนทัลปีของแต่ละองค์ประกอบ และหาค่าเอนทัลปีรวมของวัฏภาคไอ (H_n^V) และคำนวณหาค่าเอนทัลปีของแต่ละองค์ประกอบในวัฏภาคของของเหลว จากค่าอุณหภูมิที่ทราบและหาค่าเอนทัลปีรวมในวัฏภาคของของเหลว (H_n^L)

3. คำนวณหาค่าฟลักซ์ความร้อนของ Jacket

ค่าฟลักซ์ความร้อนของ Jacket (Q_b) หาจากสมการ (54) ซึ่งทราบค่าอุณหภูมิของ Jacket จากปฏิบัติการกลั่น และค่าอุณหภูมิของถังปฏิกรณ์เคมีจากการคำนวณในขั้นตอนที่ 1 สำหรับค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน (U_b) หาจากการคำนวณในภาคผนวก ข. และพื้นที่แลกเปลี่ยนความร้อน (A_b) กำหนดให้คงที่ตลอดการทดลอง

4. คำนวณหาค่าอัตราระเหย

เมื่อทราบค่า Q_b H_b^V และ H_b^L แทนค่าในสมการ (52) เพื่อหาค่าอัตราการระเหย (V_b) โดยค่าอัตราการป้อน (F_f) กำหนดให้คงที่

5. คำนวณค่าโมลรวมที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาจากสมการ (48) โดยทราบค่าจำนวนโมลรวมเริ่มต้นของของผสม

6. คำนวณค่าโมลย่อยที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาจากสมการ (50) โดยการอินทิเกรทเชิงตัวเลขโดยวิธีการ Runge-Kutta ลำดับที่ 4

3.2.2 การอินทิเกรทเชิงตัวเลข

จากสมการ (48) เป็นสมการอนุพันธ์อันดับหนึ่งเชิงเส้นรูป

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{62}$$

ในการหาคำตอบของสมการอนุพันธ์ใช้วิธีอินทิเกรทเชิงตัวเลข โดยวิธี Runge-Kutta อันดับที่สี่ ซึ่งเป็นวิธีที่นิยมใช้กันทางปฏิบัติมาก

ถ้ากำหนดให้

$$k_1 = hf(x_n, y_n) \tag{63}$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right) \tag{64}$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right) \tag{65}$$

$$k_4 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + k_3\right) \tag{66}$$

ดังนั้น $$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \tag{67}$$