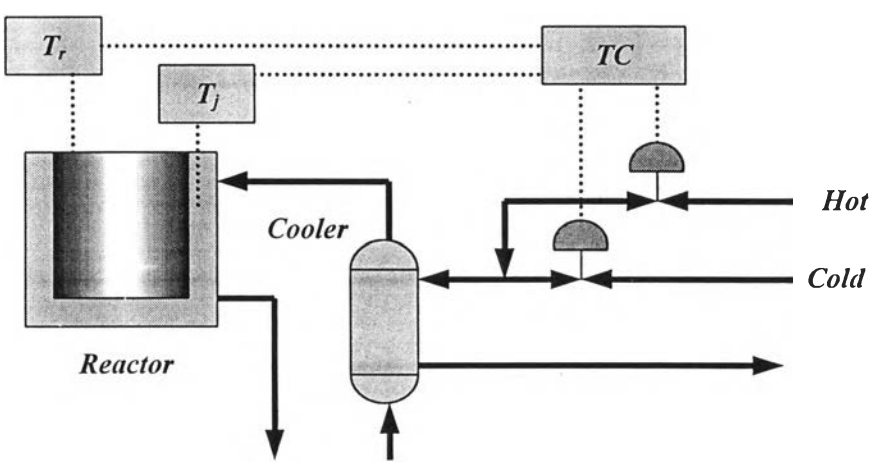
บทที่ 3

การจำลองถังปฏิกรณ์เคมีแบบกะที่มีปฏิกิริยาคายความร้อน

เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบกะเป็นเครื่องปฏิกรณ์ที่นิยมใช้กับกระบวนการผลิตที่ผลิตภัณฑ์มีราคาแพง ผลิตได้ในประมาณเล็กน้อย ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นรุนแรง มีหลายขั้นตอน อาทิ เช่น การผลิตยา การผลิตอาหาร เป็นต้น ลักษณะของกระบวนการแบบกะเป็นกระบวนการที่ป้อนสารตั้งต้นลงในถังปฏิกรณ์เพียงครั้งเดียว ทำให้ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์แบบกะจะไม่มีสภาวะคงตัว (Steady State) ในการศึกษานี้มุ่งเน้นการนำระบบควบคุมแบบโมเดลพรีดิกทีฟมาประยุกต์ใช้กับถังปฏิกรณ์เคมีแบบกะที่มีปฏิกิริยาคายความร้อน การควบคุมอุณหภูมิในถังปฏิกรณ์ให้ได้อุณหภูมิที่กำหนดทำให้สามารถผลิตผลิตภัณฑ์ให้มีคุณภาพตามที่กำหนดไว้ จากปฏิกิริยาที่มีการคายความร้อนสูง เพื่อความปลอดภัยในการทดสอบ ลดค่าใช้จ่าย และลดเวลาในการศึกษา การทดสอบระบบควบคุมจึงมีการจำลองกระบวนการจริงโดยอาศัยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เพื่อใช้ในการคำนวณหาผลตอบสนองในรูปตัวแปรวัด (อุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์ Tr และอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต - Tj) จากการปรับตัวแปรปรับ (อุณหภูมินถังแจ็คเก็ต - Tjsp) แบบจำลองถังปฏิกรณ์เคมีแบบกะที่ใช้ในงานวิจัยนี้ เป็นแบบจำลองที่ Cott และ Macchato ใช้แทนกระบวนการจริงในการทดสอบระบบควบคุมแบบ GMC ในปี 1986 ถังปฏิกรณ์เคมีดังกล่าวมีส่วนประกอบดังรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบกะ

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในถังปฏิกรณ์ที่ศึกษานี้ สามารถแบ่งการจำลองสมการคณิตศาสตร์สำหรับกระบวนการนี้ได้สามส่วน คือ การจำลองปฏิกิริยาภายในถังปฏิกรณ์ที่ใช้ทฤษฎีทางจลน์พลศาสตร์เพื่อหาความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาเคมี การจำลองการถ่ายเทความร้อนในถังปฏิกรณ์ที่อาศัยหลักสมดุลพลังงานเพื่อให้ทราบการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์ และการจำลองการถ่ายเทความร้อนในถังแจ็คเก็ต เพื่อให้ทราบถึงการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิของน้ำในถังแจ็คเก็ต มีรายละเอียดดังนี้ คือ

3.1 สมการจำลองปฏิกิริยาเคมีภายในถังปฏิกรณ์

สมการจำลองปฏิกิริยาเคมีภายในถังปฏิกรณ์ เพื่อใช้ในการคำนวณหาความร้อนที่เกิดขึ้นจากการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาคายความร้อนชนิดผันกลับไม่ได้สองสมการเคมีที่เกิดขนานกัน โดยเริ่มผลิตจากสารตั้งต้นสองชนิด แทนด้วยสัญลักษณ์ A และ B ตามลำดับ ทำปฏิกิริยาได้ผลิตภัณฑ์สองชนิดแทนสัญลักษณ์เป็น C และ D ตามลำดับ สมการเคมีที่เกิดขึ้นเขียนได้ดังนี้

$$\begin{aligned} A + B &\rightarrow C \\ A + D &\rightarrow D \end{aligned} \qquad (3\text{-}1)$$

ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาอันดับสอง อาศัยสมการของอาลีเนียสเป็นพื้นฐานในการสร้างแบบจำลองสำหรับการประมาณค่า โดยเขียนสมการคณิตศาสตร์ของทั้งสองสมการเคมีได้ดังนี้

$$\begin{aligned} R_1 &= k_1 M_A M_B \\ R_2 &= k_2 M_A M_C \end{aligned} \qquad (3\text{-}2)$$

โดยที่ k เป็นค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาที่ไม่แปรผันตามปริมาณของสารตั้งต้นแต่แปรผันตามอุณหภูมิและความดัน สำหรับกระบวนการที่มีความดันคงที่จะสามารถหาค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาจากสมการอาลีเนียสดังสมการต่อไปนี้

$$k_1 = k_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT_r}\right) \qquad (3\text{-}3)$$

ในปฏิกิริยาของ Cott and Macchato (1986) นี้ จะเขียนสมการ 3-3 ใหม่โดยให้ $k_0 = \exp(k^1)$ ทำให้สามารถเขียนสมการหาค่าคงที่การเกิดปฏิกิริยาได้ดังนี้

$$k_1 = \exp\left(k_1^1 - \frac{k_1^2}{T_r + 273.15} \right)$$
$$k_2 = \exp\left(k_2^1 - \frac{k_2^2}{T_r + 273.15} \right) \qquad (3\text{-}4)$$

โดยที่

$k_1^1 = 20.9057$ $\quad k_2^1 = 38.9057$

$k_1^2 = 10{,}000$ $\quad k_2^2 = 17{,}000$

จากสมการ 3-4 พบว่าอัตราการเกิดปฏิกิริยาในปฏิกิริยาคายความร้อนมีค่าขึ้นกับปริมาณสารและอุณหภูมิภายในถังปฏิกริยา ดังนั้นการตั้งอุณหภูมิอ้างอิง (Trsp) ในถังปฏิกรณ์ที่อุณหภูมิสูงจะสามารถลดระยะเวลาของปฏิกิริยาในถังลง แต่การควบคุมที่อุณหภูมิสูงจะต้องคำนึงถึงข้อจำกัดในการดึงความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์ ได้แก่ ปริมาณและอุณหภูมิของสารใช้ปรับอุณหภูมิของถังปฏิกรณ์ ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนที่ผนังของถังปฏิกรณ์ เป็นต้น จากสมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสมการเคมีทั้งสองสามารถหาอัตราการลดลงของสารตั้งต้นและอัตราการเพิ่มขึ้นของผลิตภัณฑ์ได้ดังสมการที่ 3-5

$$\frac{dM_A}{dt} = -R_1 - R_2 \quad \frac{dM_B}{dt} = -R_1$$
$$\frac{dM_C}{dt} = R_1 - R_2 \quad \frac{dM_D}{dt} = R_2 \qquad (3\text{-}5)$$

ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาคายความร้อนโดยความร้อนที่เกิดขึ้นสามารถเขียนเป็นแบบจำลองเพื่อหาพลังงานความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาทั้งสองสมการเคมีได้ดังสมการ 3-6

$$Q_r = - \Delta H_1 R_1 - \Delta H_2 R_2 \qquad (3\text{-}6)$$

โดยที่

$\Delta H_1 = - 41840$ kJ/kmol

$\Delta H_2 = - 25105$ kJ/kmol

3.2 สมการจำลองการถ่ายเทความร้อนในถังปฏิกรณ์

การศึกษาการถ่ายเทความร้อนในถังปฏิกรณ์เป็นการศึกษาผลกระทบของความร้อนที่เกิดขึ้นในถังปฏิกรณ์ที่มีต่ออุณหภูมิของสารในถังปฏิกรณ์และอุณหภูมิภายในถังแจ็คเก็ต ความแตกต่างของอุณหภูมิภายในและภายนอกถังปฏิกรณ์เป็นแรงขับที่ทำให้เกิดการถ่ายเทความร้อน

ผ่านผนังถังปฏิกรณ์โดยมีค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนของถังปฏิกรณ์มีค่าเท่ากับ U_r ทำให้สามารถเขียนสมการคำนวณพลังงานที่ถ่ายเทผ่านผนังถังปฏิกรณ์ได้ดังนี้

พลังงานที่ถ่ายเทผ่านผนังถังปฏิกรณ์ = $UA(Tr-Tj)$ (3-7)

เมื่อพิจารณาสมดุลพลังงานที่ผนังถังปฏิกรณ์ จะได้ว่าความร้อนที่ทำให้อุณหภูมิภายของสารภายในถังปฏิกรณ์เปลี่ยนแปลงเป็นผลรวมของความร้อนที่เกิดจากปฏิกิริยาเคมีกับความร้อนที่ถ่ายเทผ่านผนังถังปฏิกรณ์

$$W_r C_p \frac{dT_{rm}}{dt} = Q_r - U_r A_r (T_{rm} - T_{jm}) \qquad (3\text{-}8)$$

โดยที่

$$A_r = \frac{2W_r}{r\varrho}$$

$$W_p = \frac{M_A MW_A + M_B MW_B + M_C MW_C + M_D MW_D}{M_A + M_B + M_C + M_D}$$

$$C_p = \frac{M_A Cp_A + M_B Cp_B + M_C Cp_C + M_D Cp_D}{M_A + M_B + M_C + M_D}$$

เมื่อ

$MWa = 30$ kg/kmol	$MWb = 100$ kg/kmol
$MWc = 130$ kg/kmol	$MWd = 160$ kg/kmol
$Cpa = 75.31$ kJ/kmol-C	$Cpb = 167.36$ kJ/kmol-C
$Cpc = 217.57$ kJ/kmol-C	$Cpd = 334.73$ kJ/kmol-C
$r = 0.5$ m	$\rho = 1.0$ kg/m^3
$Ur = 40.842$ kJ/min-m^2-C	

จากสมการสมดุลพลังงาน สามารถเขียนสมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์เพื่อใช้เป็นแบบจำลองเพื่อใช้แทนกระบวนการสำหรับหาการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์(ตัวแปรวัดของกระบวนการ) ได้ดังนี้

$$\frac{dT_{rm}}{dt} = \frac{Q_r - U_r A_r (T_{rm} - T_{jm})}{W_r C_p} \qquad (3\text{-}9)$$

3.3 สมการจำลองการถ่ายเทความร้อนภายในถังแจ็คเก็ต

การให้ความร้อนและการดึงความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์เคมีขึ้นอยู่กับขั้นตอนของการเกิดปฏิกิริยา โดยในช่วงแรกของการเกิดปฏิกิริยาจะเป็นการให้ความร้อนแก่ถังปฏิกรณ์เพื่อให้สารตั้งต้นมีพลังงานเพียงพอที่จะเกิดปฏิกิริยา และในช่วงหลังจะเป็นการดึงความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์หลังจากเกิดปฏิกิริยาคายความร้อน โดยระบบควบคุมจะกำหนดอัตราการไหลคงที่ Fj และปรับอุณหภูมิในถังแจ็กเก็ตตามที่ระบบควบคุมกำหนด เพื่อให้อุณหภูมิในถังปฏิกรณ์เข้าสู่ค่าที่ตั้งไว้ ดังนั้น อุณหภูมิของสารในถังแจ็คเก็ตขาเข้าและขาออกจะเปลี่ยนแปลงไปและสามารถเขียนสมการของความร้อนที่ได้จากการป้อนสารในถังแจ็คเก็ตดังสมการ 3-10

ความร้อนที่ได้จากการป้อนสารในถังแจ็คเก็ต = $- F_j C_p \rho (T_j - T_{jsp})$ (3-10)

เมื่อพิจารณาถึงสมดุลพลังงานพบว่าความร้อนที่ทำให้อุณหภูมิของสารในถังแจ็คเก็ตเปลี่ยนแปลงเท่ากับผลรวมของความร้อนที่เกิดจากป้อนสารเข้าสู่แจ็คเก็ต และการถ่ายเทความร้อนที่ผนังถังปฏิกรณ์

$$VC_p\rho\frac{dT_{jm}}{dt} = FC_p\rho(T_{jm} - T_{jsp}) + U_r A_r (T_{rm} - T_{jm}) \qquad (3\text{-}11)$$

โดยที่

$\rho_j = 1000\ kg/m^3$

$Vj = 0.6912\ m^3$

$Cpj = 1.8828\ kJ/kmol\text{-}C$

$Fj = 0.348\ kg/min$

จากสมการสมดุลพลังงาน สามารถเขียนสมการการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในถังแจ็คเก็ต เพื่อใช้คำนวณหาอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ต(ตัวแปรวัดของกระบวนการ) ได้ดังนี้

$$\frac{dT_{jm}}{dt} = \frac{U_r A_r (T_{rm} - T_{jm})}{V_j C_{pj\ \ j}} - \frac{F_j}{V_j}(T_{rm} - T_{jm}) \qquad (3\text{-}12)$$

การวัดตัวแปรวัดทั้งอุณหภูมิภายในถังปฏิกรณ์และอุณหภูมิในถังแจ็คเก็ตในกระบวนการจริงจะมีสัญญาณรบกวนในการวัด ในการศึกษานี้การจำลองถังปฏิกรณ์เคมีจึงมีการเพิ่มความสัญญาณในการวัดแบบ Gaussian ที่มีความเบี่ยงเบนเท่ากับ 0.033 C และสามารถเขียนสมการหาตัวแปรวัดใหม่ได้ดังนี้

$$Tr = Tr + a \qquad (3\text{-}13)$$
$$Tj = Tj + b$$

โดยที่ a ค่าคงที่ที่มีการเบี่ยงเบน = 0.33 C
b ค่าคงที่ที่มีการเบี่ยงเบน = 0.33 C

จากงานวิจัยของ Cott and Macchato (1989) การจำลองถังปฏิกรณ์นี้ผลิตภัณฑ์ที่ต้องการคือ สาร C ซึ่งได้ทำการทดสอบกระบวนการดังกล่าวพบว่าอุณหภูมิที่ภายในถังปฏิกรณ์ที่เหมาะสมในการผลิตคือ 90-100 C ในการจำลองถังปฏิกรณ์เคมีเพื่อให้สามารถแทนกระบวนการจริงสำหรับใช้ทดสอบระบบควบคุม ในการจำลองจึงควรจำลองที่ความถี่สูงเพื่อให้สามารถแทนพลวัติของกระบวนการจริง และความถี่ที่ใช้จะต้องสามารถคำนวณพลวัตของกระบวนการในระบบวงเปิดได้ ในการทดสอบระบบควบคุมจะทำการตั้งอุณหภูมิภายของสารในถังปฏิกรณ์ให้มีค่าเท่ากับ 95 C