

การจำลองเครื่องปฏิกรณ์ชนิดสมดุลเคมีสำหรับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน



นาย ปิยะศักดิ์ บุญนคร

สถาบันวิทยบริการ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

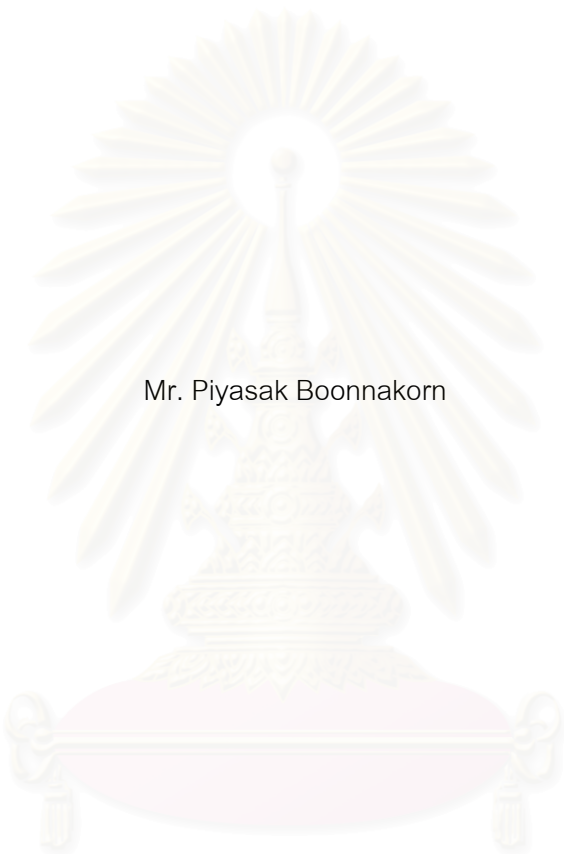
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2545

ISBN 974-17-1026-7

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

SIMULATION OF EQUILIBRIUM REACTOR FOR ETHYLENE AND PROPYLENE PRODUCTION



Mr. Piyasak Boonnakorn

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

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

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2002

ISBN 974-17-1026-7

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การจำลองเครื่องปฏิกรณ์ชนิดสมดุลเคมีสำหรับการผลิตเอทิลีนและ
โพรพิลีน
โดย นาย ปิยะศักดิ์ บุญนคร
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้หัวข้อวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วน
หนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาโทบริหารธุรกิจ

..... คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ ปัญญาแก้ว)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ
(รองศาสตราจารย์ ดร. สุธรรม วาณิชเสนี)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช)

..... กรรมการ
(อาจารย์ ดร. เจ็ดศักดิ์ ไชยคุณา)

..... กรรมการ
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิริรุ่ง ปรีชานนท์)

ปิยะศักดิ์ บุญนคร : การจำลองเครื่องปฏิกรณ์ชนิดสมดุลเคมีสำหรับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน. (Simulation of Equilibrium Reactor For Ethylene and Propylene Production)
อ. ที่ปรึกษา : ผศ. เดชา ฉัตรศิริเวช, 49 หน้า. ISBN 974-17-1026-7.

สมดุลเคมีสำหรับระบบปฏิกิริยาของอีเทนให้ผลผลิตเป็นเอทิลีน อะเซทิลีน และ ไฮโดรเจน ในขณะที่สมดุลเคมีสำหรับระบบปฏิกิริยาของโพรเพนให้ผลผลิตเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอน ทั้งหมดที่มีมวลโมเลกุลน้อยกว่าโพรเพน และไฮโดรเจน สมดุลการผลิตเอทิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน ควรแยกคำนวณสมดุลเคมีระบบปฏิกิริยาของอีเทน จากสมดุลเคมีระบบปฏิกิริยาของโพรเพน ดังนั้นสมดุลผลผลิตเอทิลีน ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส สามารถเพิ่มขึ้นได้ร้อยละ 32.44 ของโพรเพนและผลิตโพรพิลีนได้ร้อยละ 9.77 ของโพรเพนที่ผสมในอีเทน สมดุลสัดส่วนการผลิตเอทิลีนจากแก๊สอีเทนที่ผสมโพรเพนร้อยละ 52.60 สามารถเพิ่มขึ้นได้สูงสุดถึงร้อยละ 51.76 ณ อุณหภูมิ 880 องศาเซลเซียส



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2545

ลายมือชื่อนิสิต.....
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม

4270429421 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD: CRACKING / ETHANE / PROPANE / MODELING / PYROLYSIS

PIYASAK BOONNAKORN : THESIS ADVISOR : ASSISTANT PROFESSOR
DEACHA CHATSIRIWECH, Ph.D., 49 pp. ISBN 974-17-1026-7.

Chemical Equilibria of ethane produced ethylene, acetylene and hydrogen. While that of propane could produced all hydrocarbon compounds with less molecular weight than propane and hydrogen. Equilibrium production of ethylene from the mixture of ethane and propane could be obtained by calculating the chemical equilibria of ethane and that of propane separately. Therefore, the production of ethylene could be increased by 32.44% of propane and propylene was produced by 9.77% of propane added to ethane. Equilibrium yield of ethylene from the mixture containing 52.60% propane, reached the maximum value of 51.76% at 880 °C



Department Chemical Engineering
Field of study Chemical Engineering
Academic year 2002

Student's signature.....
Advisor's signature.....
Co-advisor's signature.....

กิตติกรรมประกาศ

ผู้จัดทำวิทยานิพนธ์ขอขอบพระคุณอาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวชที่กรุณาให้ความเอาใจใส่และให้คำแนะนำที่เป็นประโยชน์สำหรับงานวิจัยนี้ ด้วยดีตลอดมา

ขอขอบคุณประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ รองศาสตราจารย์ ดร. สุธรรม วาณิชเสนี และกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ดร. เจตศักดิ์ ไชยคุณา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิริรุ่ง ปรีชานนท์ สำหรับความช่วยเหลือ ตั้งแต่การสอบตรวจโครงร่างวิทยานิพนธ์ ตลอดจนข้อเสนอแนะต่างๆ

ท้ายที่สุด ขอขอบคุณครอบครัว และเพื่อนๆที่เป็นกำลังใจด้วยดีตลอดมา



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อ(ภาษาไทย).....	ง
บทคัดย่อ(ภาษาอังกฤษ)	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สัญลักษณ์และอักษรย่อ.....	ญ
1 อุตสาหกรรมการผลิตเอททีนและโพรพิลีน.....	1
2 ระบบปฏิกิริยาเคมีของการผลิตเอททีนและโพรพิลีน.....	6
2.1 ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอททีนจากอีเทน.....	6
2.2 ระบบปฏิกิริยาการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน.....	7
2.3 ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอททีนและโพรพิลีนจากแนฟธา.....	9
2.4 ระบบสมการคณิตศาสตร์สำหรับการพยากรณ์การผลิตเอททีน และโพรพิลีน.....	10
3 ผลผลิตเอททีนจากอีเทนผสมโพรเพน.....	21
3.1 การทดสอบแบบจำลองระบบปฏิกิริยาการผลิตเอททีนจากอีเทน.....	21
3.2 การทดสอบแบบจำลองระบบปฏิกิริยาการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน.....	28
3.3 การผลิตเอททีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน.....	35
4 สรุปผลการทดลองและข้อเสนอแนะ	
4.1 สรุปผลการวิจัย.....	45
4.2 ข้อเสนอแนะ.....	46
รายการอ้างอิง.....	47
ประวัติผู้เขียน.....	49

สัญลักษณ์และอักษรย่อ

สัญลักษณ์

A, a	จำนวนอะตอม
c	จำนวนสารประกอบในระบบ
F	อัตราการไหลของก๊าซ (mol/sec)
G	พลังงานอิสระของกิบส์ (kJ/mol)
K	ค่าคงที่สมดุลเคมี
L	ฟังก์ชันของความสัมพันธ์พลังงานอิสระและอนุรักษอะตอม
m	ปริมาณสารตั้งต้นที่เกิดปฏิกิริยา (mol)
n	ปริมาณสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบปฏิกิริยา (mol)
P	ความดัน (atm)
R	ค่าคงที่แก๊ส (liter.atm.mol ⁻¹ K ⁻¹) หรือ จำนวนปฏิกิริยาเคมี
T	อุณหภูมิ (K)
X	สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา
Y	สัดส่วนการผลิต
y	สัดส่วนโมล

เครื่องหมายข้างใต้

in	สายป้อนเข้าระบบ
out	สายดึงออกจากระบบ
i	ลำดับสารประกอบที่ i
k	ลำดับธาตุที่ k
r	ลำดับปฏิกิริยาที่ r
t	จำนวนทั้งหมด

อักษรกรีก

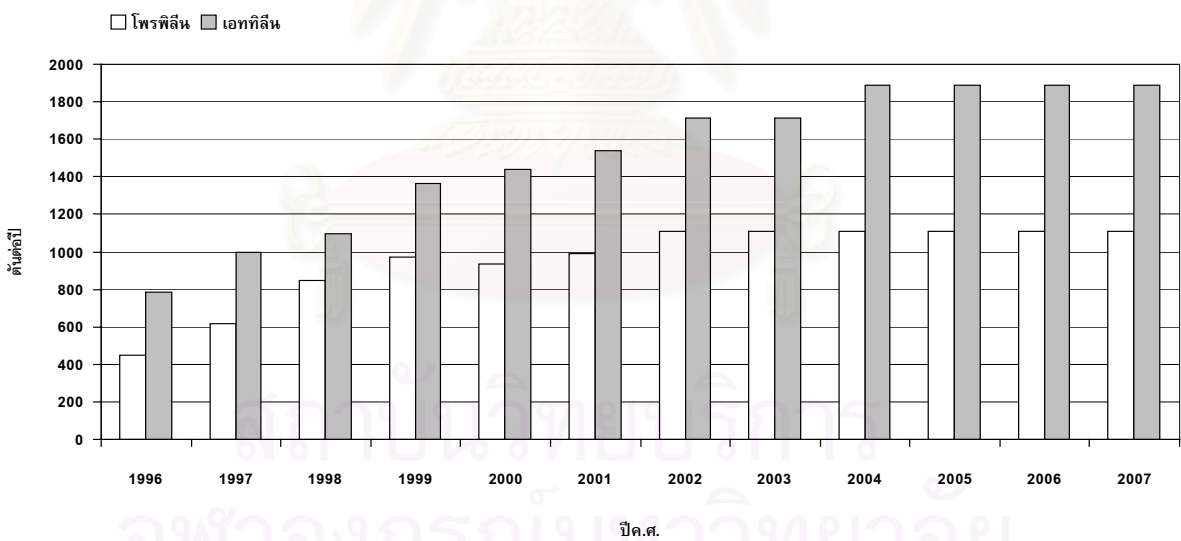
ν	ปริมาณสัมพันธ์ (stoichiometry)
ϕ	ค่าสัมประสิทธิ์ของฟูกาซิตี
λ	ค่าของลากรานจ์

บทที่ 1

อุตสาหกรรมการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน

อุตสาหกรรมการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจัดอยู่ในกลุ่มของอุตสาหกรรมขั้นพื้นฐานที่อยู่ใต้อุตสาหกรรมปิโตรเคมีทั้งหมด การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนนั้นอาจผลิตได้จากอีเทนและโพรเพนตามลำดับ หรือจากสารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมเช่น แนฟธาและแก๊สออยล์ เป็นต้น ซึ่งเป็นผลผลิตที่ได้จากกระบวนการกลั่นน้ำมันปิโตรเลียม

ในอุตสาหกรรมปิโตรเคมี เอทิลีนและโพรพิลีนเป็นสารตั้งต้นที่สำคัญสำหรับอุตสาหกรรมผลิตพอลิเมอร์ชนิดต่างๆ นอกจากนี้เอทิลีนและโพรพิลีนสามารถใช้ผลิตสารประกอบอินทรีย์ชนิดอื่นได้ อาทิเช่น เอทิลีนออกไซด์ เอทิลีนไกลคอล แอลกอฮอล์ เป็นต้น [1-5] จากคุณสมบัติทางเคมีของเอทิลีนและโพรพิลีนที่สามารถเกิดปฏิกิริยาก่อให้เกิดผลิตภัณฑ์ที่มีประโยชน์ต่างๆมากมาย ดังนั้นความต้องการสารประกอบทั้งสองสำหรับในอุตสาหกรรมปิโตรเคมียังคงมีแนวโน้มเพิ่มมากขึ้น ดังเช่นอุตสาหกรรมปิโตรเคมีในประเทศดังรูปที่ 1.1



รูปที่ 1.1 ประมาณการปริมาณความต้องการเอทิลีนและโพรพิลีนในประเทศไทย[5]

แก๊สธรรมชาติเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสม สารประกอบหลักของแก๊สธรรมชาติคือมีเทน นอกจากนี้มีเทนในแก๊สธรรมชาติยังมีสารประกอบที่สำคัญอื่นๆได้แก่อีเทนและโพรเพน ปริมาณของอีเทนและโพรเพนในแก๊สธรรมชาติที่ผลิตได้ในประเทศไทยอาจมีปริมาณมากถึงร้อยละ 20 โดยโมล ปริมาณและสัดส่วนของสารขององค์ประกอบต่างๆในแก๊สธรรมชาติมักแตกต่างกันขึ้นกับแหล่งผลิตแก๊สธรรมชาติดังตัวอย่างที่แสดงไว้ในตารางที่ 1.1 ดังนั้นจึงต้องแยกอีเทนและโพรเพนออกจากแก๊สธรรมชาติสำหรับใช้เป็นวัตถุดิบในกระบวนการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนตามลำดับ อีเทนและโพรเพนสามารถแยกออกจากแก๊สธรรมชาติด้วยการกลั่นที่สภาวะเยือกเย็น(Cryogenic Distillation)

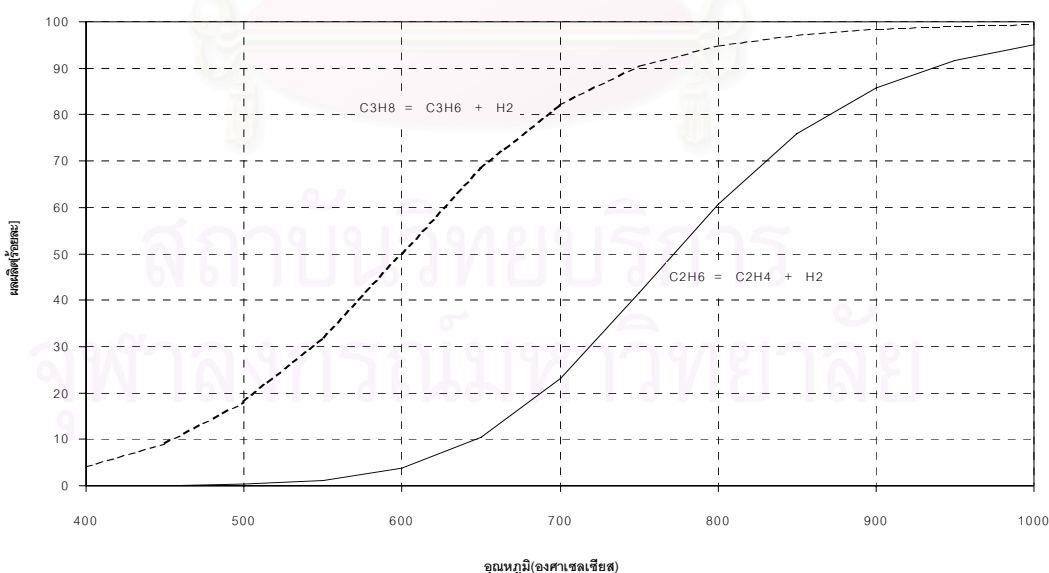
ตารางที่ 1.1 ส่วนประกอบตัวอย่างของแก๊สธรรมชาติในประเทศตามแหล่งการผลิต[1,6]

	แหล่งแก๊สธรรมชาติ						
	เอราวัณ	บรพต	สิริกิต	น้ำพอง	พูนัน	ปลาทอง	บงกต
สารประกอบ	ปริมาณผลผลิต(ร้อยละโดยโมล)						
มีเทน	64.01	70.88	72.64	94.04	69.76	66.78	61.85
อีเทน	8.07	8.83	10.98	0.67	7.50	7.22	7.80
โพรเพน	4.56	4.08	8.33	0.10	3.78	3.83	4.32
อื่นๆ	23.34	16.15	8.05	5.19	18.67	22.06	0.96

การผลิตเอทิลีนจากอีเทนในอุตสาหกรรมจำเป็นต้องดำเนินการ ณ อุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส [7-14] เพื่อให้เอทิลีนเกิดขึ้นได้มากกว่าร้อยละ 60 โดยไม่ถูกจำกัดด้วยสมดุลเคมีเพื่อให้สัดส่วนการเกิดเอทิลีนมากกว่าร้อยละ 60 ดังแสดงในรูปที่1.2 ทั้งนี้เพื่อให้กระบวนการผลิตเอทิลีนมีความเหมาะสมในเชิงธุรกิจ ภายใต้สภาวะดังกล่าวอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีอาจเกิดขึ้นได้รวดเร็วเพียงพอจึงไม่มีความจำเป็นต้องใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีหรือตัวเร่งปฏิกิริยาไม่อาจทนต่ออุณหภูมิสูงนี้ได้จึงต้องใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมีเลย แต่การดำเนินการที่อุณหภูมิสูงนอกจากเอทิลีนแล้วยังเกิดสารประกอบอื่นๆที่ไม่ต้องการด้วยเช่น มีเทน อะเซทิลีน โพรเพน โพรพิลีน บิวเทน บิวทิลีน บิวโทลีน [14-17] นอกจากนี้ยังก่อให้เกิดไค้กซึ่งมีลักษณะเป็นของแข็งเกาะติดพื้นผิวภายในเครื่องปฏิกรณ์เคมีและมีผลให้อัตราการถ่ายโอนพลังงานความร้อนให้กับปฏิกิริยาเคมีลดลง[18-20] ดังนั้นในขณะที่ป้อนอีเทนเข้าสู่เครื่องปฏิกรณ์เคมีจึงต้องผสมไอน้ำด้วย โดยไอน้ำจะทำหน้าที่เป็นแหล่งพลังงานความร้อนสำหรับการเกิดปฏิกิริยาเคมี ช่วยลดและป้องกันการเกิดไค้กภายในเครื่องปฏิกรณ์เคมีได้ และช่วยลด

ความดันย่อยของแก๊สเอทิลีนและไฮโดรเจนภายในเครื่องปฏิกรณ์เคมีทำให้ได้ผลผลิตเพิ่มมากขึ้น โดยเฉพาะอย่างยิ่งเมื่อระบบปฏิกิริยาเคมีกำลังเข้าสู่สภาวะสมดุลเคมีตามหลักของเลอชาเตอลิเยร์ (Le Chatelier's principle) สำหรับปฏิกิริยาที่มีจำนวนโมลเพิ่มมากขึ้น แต่การใช้ไอน้ำผสมอีเทน นอกจากช่วยลดความดันย่อยของเอทิลีนและไฮโดรเจนแล้วยังลดความดันย่อยของอีเทนซึ่งเป็น สารตั้งต้นของปฏิกิริยาดังกล่าว จึงมีผลให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาของอีเทนลดต่ำลงซึ่งเป็นสัดส่วน กับความดันย่อยของอีเทน แต่ผลกระทบของความดันย่อยต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาอาจชดเชย ได้ด้วยอิทธิพลของอุณหภูมิต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี โดยให้ปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นที่อุณหภูมิ สูงขึ้น

สำหรับการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนในอุตสาหกรรม สามารถดำเนินการได้ที่ อุณหภูมิต่ำกว่า 700 องศาเซลเซียส [7-9,11] ดังแสดงในรูปที่ 1.2 เนื่องจากสภาวะที่อุณหภูมิ สูง โพรเพนสามารถเปลี่ยนเป็นสารประกอบอื่นๆที่ไม่ต้องการหลายชนิด เช่น มีเทน อะเซทิลีน โพรพาไดอิน โพรไพน์ บิวเทน บิวไทน์ และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลมากกว่า บิวเทน ดังนั้นการผลิตโพรพิลีนจึงได้ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยา เพื่อลดอัตราการเกิดผลิตภัณฑ์อื่นที่ไม่ ต้องการดังกล่าวซึ่งมีจำนวนชนิดของสารประกอบอื่นๆมากขึ้น แต่การใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเหล่านั้น ยังคงไม่อาจหลีกเลี่ยงการเกิดโค้กภายในเครื่องปฏิกรณ์เคมีได้และไม่อาจใช้ไอน้ำป้องกันการเกิด โค้กเช่นเดียวกับเครื่องปฏิกรณ์เคมีสำหรับการผลิตเอทิลีน ดังนั้นสำหรับกระบวนการผลิต โพรพิลีนจำเป็นต้องปรับสภาพตัวเร่งปฏิกิริยาให้สามารถทำหน้าที่ได้ดังเดิม



รูปที่ 1.2 ผลผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากอีเทนและโพรเพนตามลำดับ ณ สมดุลเคมี ที่อุณหภูมิ 400 ถึง 1000 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ

สารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมอื่น ๆ สำหรับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนได้แก่ แนฟธา แก๊สออยล์ เป็นต้น แนฟธาและแก๊สออยล์เป็นสารผสมของไฮโดรคาร์บอนที่มีไฮโดรคาร์บอนหลายชนิดรวมกัน ลักษณะเฉพาะของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมจึงกำหนดจาก มวลโมเลกุลเฉลี่ย ช่วงของจุดเดือด และอัตราส่วนของอะตอมคาร์บอนต่อไฮโดรเจน โดยช่วงจุดเดือดของแนฟธาโดยประมาณคือ 40 - 180 องศาเซลเซียส ส่วนจุดเดือดของแก๊สออยล์อยู่ในช่วงอุณหภูมิ 200 - 350 องศาเซลเซียส การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแนฟธาหรือแก๊สออยล์ต้องดำเนินการ ณ อุณหภูมิของปฏิกิริยาเคมีสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส [7-14,21-22] และใช้ไอน้ำร่วมผสมสำหรับปฏิกิริยา ดังนั้นการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนใช้แนฟธาจึงไม่ใช่ตัวเร่งปฏิกิริยาเคมี ในลักษณะเดียวกับการผลิตเอทิลีนจากอีเทน ชนิดและสัดส่วนของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่เกิดจากแนฟธาสรุปได้ดังตารางที่ 1.2 [21-22]

ตารางที่ 1.2 ปริมาณของผลิตภัณฑ์ที่ได้จากปฏิกิริยาสลายตัวของแนฟธา

อุณหภูมิ (องศาเซลเซียส)	800	820	900
มวลไอน้ำต่อมวลแนฟธา	0.75	0.75	-
	ผลผลิต(ร้อยละ)		
ไฮโดรเจน	0.62	0.71	1.10
มีเทน	12.63	14.21	16.40
อะเซทิลีน	0.17	0.28	0.90
เอทิลีน	21.89	24.00	34.40
อีเทน	3.46	3.40	3.40
โพรพิลีน	16.11	15.50	16.60
โพรเพน	0.47	0.45	0.50
สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลมากกว่าโพรเพน	44.65	41.45	26.70

จากการพิจารณาสภาวะของการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากวัตถุดิบอีเทน โพรเพน และแนฟธา เห็นได้ว่าสภาวะของการผลิตเอทิลีนอุณหภูมิของปฏิกิริยาจะอยู่สูงกว่า 800 องศาเซลเซียส ส่วนสภาวะของการผลิตโพรพิลีนอุณหภูมิของปฏิกิริยาอยู่ต่ำกว่า 700 องศาเซลเซียส ดังนั้นการศึกษาปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนสำหรับงานวิจัยนี้จึงได้จำกัดสภาวะของการเกิดปฏิกิริยาเคมีอยู่ในช่วงอุณหภูมิ 800 ถึง 1000 องศาเซลเซียส และวัตถุดิบสำหรับการผลิตเอทิลีนใช้สารผสมอีเทนและโพรเพน การเลือกใช้สารผสมอีเทนกับโพรเพนเนื่องจาก

สารทั้งสองเป็นอินทรีย์สารที่เป็นองค์ประกอบที่มีอยู่ในแก๊สธรรมชาติ ดังนั้นในการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนได้โดยใช้สารผสมอีเทนและโพรเพน โดยไม่ต้องแยกอีเทนและโพรเพนออกจากแก๊สธรรมชาติจะเป็นแนวทางในการศึกษาระบบปฏิบัติการการผลิตสารประกอบกลุ่มโอเลฟินส์ จากสารประกอบอินทรีย์ผสมที่ได้จากแก๊สธรรมชาติ และสามารถใช้ศึกษาผลอุณหภูมิของปฏิกิริยาเคมีต่อผลผลิตโอเลฟินส์

จุดประสงค์ของงานวิจัย

1. พัฒนาแบบจำลองสมดุลเคมีของระบบปฏิบัติการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน
2. ศึกษาผลกระทบของอุณหภูมิ ปริมาณโพรเพนที่เพิ่มขึ้นในแก๊สอีเทนผสมโพรเพนต่อชนิดและปริมาณของผลิตภัณฑ์ตามลำดับ

ขอบเขตของงานวิจัย

1. วัตถุประสงค์สำหรับการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนคือแก๊สอีเทนผสมโพรเพน
2. สัดส่วนของโพรเพนที่เพิ่มขึ้นร้อยละ 10 – 60 โดยมวล
3. อุณหภูมิในการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนคือ 800 – 1000 องศาเซลเซียส

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 2

ระบบปฏิบัติการเคมีของการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีน

เนื่องจากการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจำเป็นต้องดำเนินการผลิต ณ อุณหภูมิที่สูงกว่า 800 องศาเซลเซียส เพื่อให้อัตราการผลิตเกิดขึ้นได้อย่างรวดเร็วและให้ผลผลิตเกิดขึ้นได้มากเพียงพอ แต่ ณ สภาวะดังกล่าวข้างต้นสารประกอบอื่นๆอาจเกิดขึ้นได้ด้วยอัตราที่เทียบเท่ากับอัตราการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีน และอาจเกิดขึ้นเป็นปริมาณมากเช่นเดียวกัน จากผลการศึกษาวิจัยและผลการวิเคราะห์ปริมาณและชนิดของสารประกอบต่างๆที่เกิดขึ้น ในการผลิตเอททิลีนจากอีเทน ณ อุณหภูมิ 673 – 838 องศาเซลเซียส พบว่าอีเทนเกิดปฏิกิริยาไปร้อยละ 5.00 – 69.40 ได้เอททิลีนเป็นผลิตภัณฑ์ร้อยละ 4.57 – 51.45 สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลน้อยกว่าเอททิลีนร้อยละ 5.00 – 61.70 และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลมากกว่าเอททิลีนร้อยละ 0.04 – 7.66 [15-16,22] สำหรับการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน ณ อุณหภูมิ 825 – 866 องศาเซลเซียส พบว่าโพรเพนเกิดปฏิกิริยาไปร้อยละ 85.90 – 95.40 ได้ผลิตภัณฑ์โพรพิลีนร้อยละ 16.40 – 10.60 เอททิลีนร้อยละ 31.30 – 36.90 สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลน้อยกว่าเอททิลีนร้อยละ 23.40 – 29.40 และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลมากกว่าโพรพิลีนร้อยละ 9.68 – 14.30 โดยมีมวล[22] ดังนั้นระบบปฏิบัติการในการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจึงพิจารณาด้วยเงื่อนไขต่อไปนี้

1. สารประกอบไฮโดรคาร์บอนในระบบการผลิตเป็นสารประกอบเสถียรและสามารถค้นหาข้อมูลอุณหพลศาสตร์ได้จากฐานข้อมูลของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนได้
2. สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่เกิดขึ้นเป็นสารประกอบที่มีมวลโมเลกุลน้อยกว่าสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเริ่มต้น

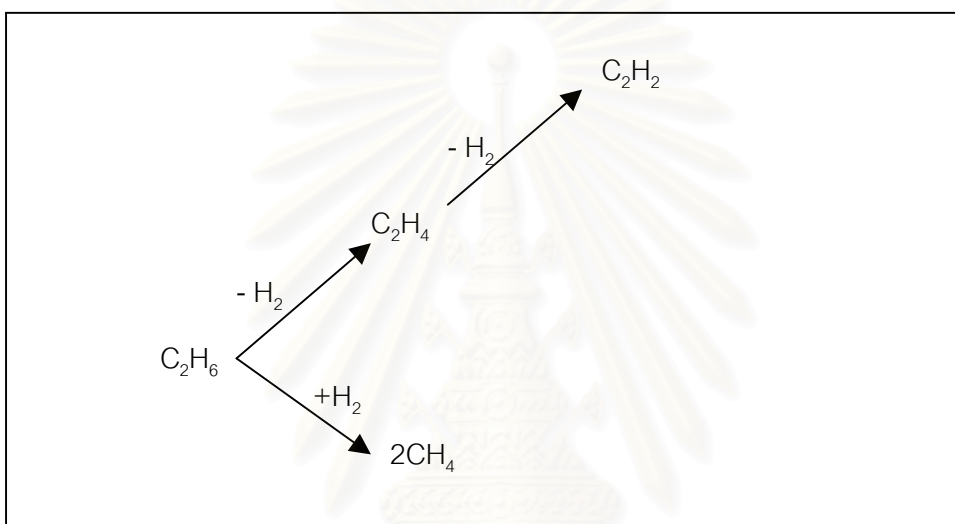
2.1 ระบบปฏิบัติการการผลิตเอททิลีนจากอีเทน

เมื่ออีเทนได้รับความร้อนจนกระทั่งมีอุณหภูมิสูงเพียงพอ อีเทนสามารถสลายตัวเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลน้อยลงและไฮโดรเจน ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นในการผลิตเอททิลีนจากอีเทนประกอบด้วยปฏิกิริยาดังต่อไปนี้

1. ปฏิกิริยาดังโมเลกุลไฮโดรเจนจากสารประกอบไฮโดรคาร์บอน

2. ปฏิกิริยาเติมโมเลกุลไฮโดรเจนให้สารประกอบไฮโดรคาร์บอนเพื่อแบ่งตัวเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวที่มีมวลโมเลกุลน้อยลง

ความสัมพันธ์ระหว่างปฏิกิริยาเคมีดังกล่าวมี 2 ลักษณะคือ กลุ่มปฏิกิริยาดังโมเลกุลไฮโดรเจนสามารถเกิดต่อเนื่องกันในลักษณะของปฏิกิริยาลูกโซ่ และกลุ่มปฏิกิริยาดังโมเลกุลไฮโดรเจนกับปฏิกิริยาเติมโมเลกุลไฮโดรเจนปฏิกิริยาทั้งสองอาจเกิดขึ้นพร้อมกัน เพื่อให้เกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆที่มีมวลโมเลกุลน้อยลงและไฮโดรเจน โดยความสัมพันธ์ระหว่างปฏิกิริยาเคมีต่างๆสามารถแสดงได้ดังในรูปที่ 2.1



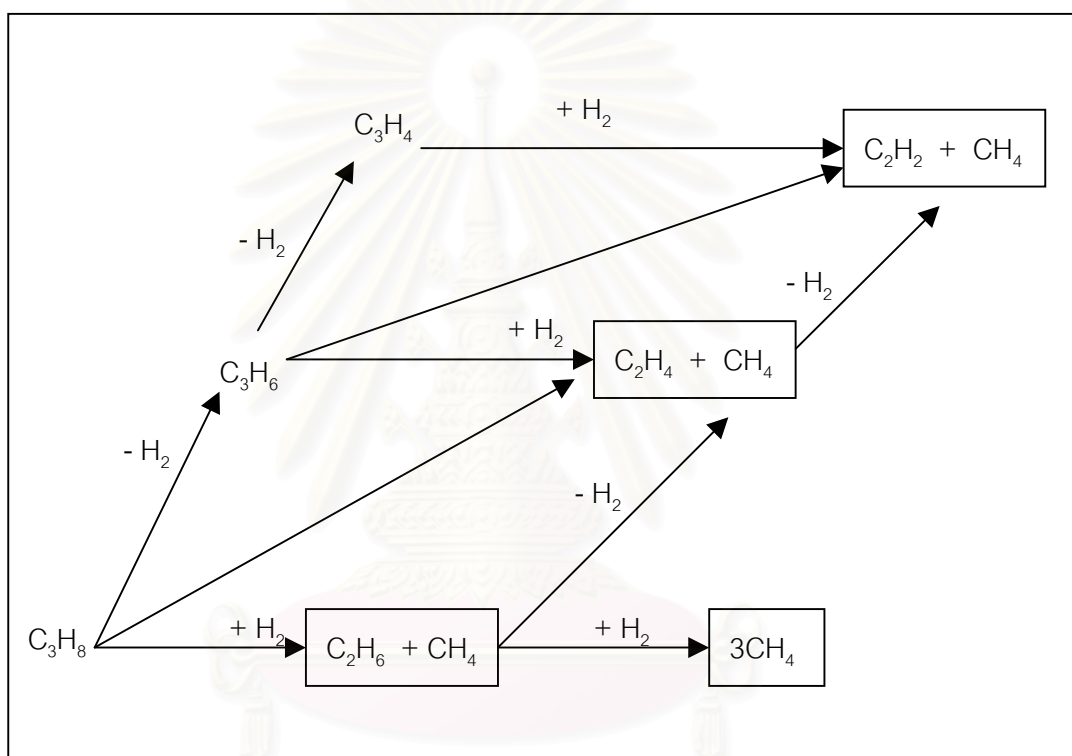
รูปที่ 2.1 ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทน

2.2 ระบบปฏิกิริยาการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน

ในลักษณะเดียวกันกับการผลิตเอทิลีนจากอีเทนเมื่อโพรเพนถูกเพิ่มอุณหภูมิให้สูงเพียงพอ โพรเพนสามารถสลายตัวเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลน้อยลงกับไฮโดรเจนได้เช่นกัน ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นในการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนประกอบด้วย

1. ปฏิกิริยาดังโมเลกุลไฮโดรเจนจากสารประกอบไฮโดรคาร์บอน
2. ปฏิกิริยาเติมโมเลกุลไฮโดรเจนให้กับสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเพื่อแบ่งเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวผสม หรือ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวและไม่อิ่มตัว ที่มีมวลโมเลกุลน้อยลง
3. ปฏิกิริยาแบ่งสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวและไม่อิ่มตัว

เช่นเดียวกับระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทน นั่นคือ กลุ่มของปฏิกิริยาตั้งโมเลกุลไฮโดรเจนนั้นสามารถเกิดขึ้นอย่างต่อเนื่องในลักษณะของปฏิกิริยาลูกโซ่ กลุ่มปฏิกิริยาตั้งโมเลกุลไฮโดรเจน ปฏิกิริยาเติมโมเลกุลไฮโดรเจน และปฏิกิริยาแย่งสารประกอบไฮโดรคาร์บอน อาจเกิดขึ้นพร้อมๆกัน เพื่อให้เกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆที่มีมวลโมเลกุลน้อยลงและไฮโดรเจน โดยความสัมพันธ์ระหว่างปฏิกิริยาเคมีต่างๆสามารถแสดงได้ดังในรูปที่ 2.2 นอกจากนี้เส้นทางการเกิดของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนบางชนิดในระบบปฏิกิริยาดังกล่าว เช่น เอทิลีนและอะเซทิลีน สามารถเกิดจากไพโรเพนด้วยเส้นทางของปฏิกิริยาเคมีได้หลายเส้นทาง



รูปที่ 2.2 ระบบปฏิกิริยาการผลิตไพโรฟิลีนจากไพโรเพน

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

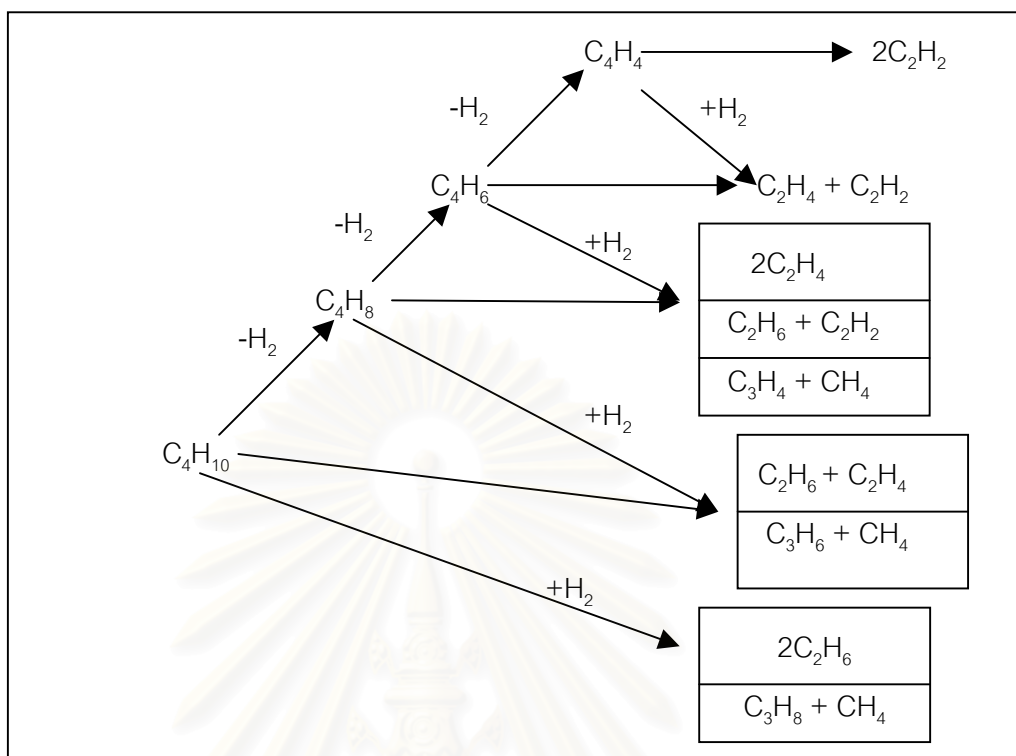
2.3 ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแนฟธา

แนฟธาเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนผสมที่ประกอบด้วยชนิดของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนจำนวนมาก ซึ่งสามารถแบ่งเป็นกลุ่มตามลักษณะโครงสร้างได้แก่ กลุ่มพาราฟิน แนฟทีน และอะโรมาติกส์ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนในแนฟธามีจำนวนอะตอมคาร์บอนมากกว่า 4 อะตอม [22-23] ดังนั้นในระบบปฏิกิริยาที่เกี่ยวข้องกับแนฟธาจึงประกอบด้วยปฏิกิริยาเคมีจำนวนมาก โดยสามารถพิจารณาจากระบบปฏิกิริยาที่เกิดจากบิวเทนเป็นตัวอย่าง ปฏิกิริยาเคมีดังกล่าวประกอบไปด้วยกลุ่มปฏิกิริยาเคมีต่อไปนี้

1. ปฏิกิริยาตัดโมเลกุลไฮโดรเจนจากสารประกอบไฮโดรคาร์บอน
2. ปฏิกิริยาเติมโมเลกุลไฮโดรเจนให้กับสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเพื่อแบ่งเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวผสม หรือ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวและไม่อิ่มตัว หรือ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวผสมที่มีมวลโมเลกุลน้อยลง
3. ปฏิกิริยาแบ่งสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเป็นสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัวและไม่อิ่มตัว หรือ สารประกอบไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัวผสม

ในลักษณะเดียวกับระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทน และโพรพิลีนจากโพรเพน นั่นคือปฏิกิริยาเคมีดังกล่าวบางส่วนเกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้นอย่างต่อเนื่องในลักษณะของปฏิกิริยาลูกโซ่ ในขณะที่ปฏิกิริยาเคมีบางส่วนอาจเกิดขึ้นพร้อมๆกัน เพื่อให้เกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆที่มีมวลโมเลกุลน้อยลงและไฮโดรเจน ดังแสดงในรูปที่ 2.3 และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆที่เกิดขึ้นอาจเกิดปฏิกิริยาได้ต่อไปในลักษณะที่แสดงไว้ในรูปที่ 2.1 และ 2.2 นอกจากสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่เกิดขึ้นจำนวนหนึ่งสามารถเกิดขึ้นได้จากเส้นทางของปฏิกิริยาเคมีได้หลายเส้นทางแล้ว เส้นทางของการเกิดปฏิกิริยาเคมีบางเส้นทางสามารถเกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนได้หลายชนิดเช่นกัน

เมื่อสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีมวลโมเลกุลมากขึ้นหรือที่มีจำนวนอะตอมคาร์บอนมากขึ้น (มากกว่า 4 อะตอม) เป็นสารประกอบเริ่มต้นของปฏิกิริยาเคมีดังกล่าวข้างต้น จำนวนชนิดของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่สามารถเกิดได้จากปฏิกิริยาเคมีดังกล่าวเพิ่มมากขึ้น จึงมีผลให้จำนวนปฏิกิริยาเคมีในระบบปฏิกิริยานั้นๆ เพิ่มมากขึ้น เมื่อเปรียบเทียบกับระบบปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นจากบิวเทน



รูปที่ 2.3 ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากบิวเทน

2.4 ระบบสมการคณิตศาสตร์สำหรับการพยากรณ์การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน

แม้ว่าได้มีการศึกษาวิจัยกลไกและอัตราการเกิดปฏิกิริยาจากอีเทนเป็นเอทิลีน และปฏิกิริยาจากโพรเพนเป็นโพรพิลีน ณ อุณหภูมิสำหรับปฏิกิริยาดังกล่าวแล้วซึ่งเน้นเฉพาะปฏิกิริยาสำคัญ ได้แก่ปฏิกิริยาการเกิดเอทิลีนจากอีเทน และปฏิกิริยาการเกิดโพรพิลีนจากโพรเพน การพยากรณ์ผลิตภัณฑ์สามารถทำนายได้เฉพาะปริมาณของเอทิลีนและโพรพิลีน แต่ไม่อาจพยากรณ์การเกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอื่นๆได้ นอกจากนี้อุณหภูมิสำหรับปฏิกิริยาเคมีสำหรับการผลิตเอทิลีนมักสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นสภาวะอุณหภูมิสูงที่ไม่ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาใดๆ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีทั้งหลายมักเพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิของปฏิกิริยาเพิ่มสูงขึ้น ซึ่งเป็นไปตามความสัมพันธ์ของอาร์เรเนียส (Arrhenius) ดังนั้นปฏิกิริยาดังกล่าวข้างต้นจึงมีแนวโน้มเข้าสู่สภาวะสมดุลเคมี ณ อุณหภูมิดังกล่าว การพยากรณ์ปริมาณการผลิตเอทิลีน โพรพิลีน และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอื่นๆ ภายใต้เงื่อนไขสมดุลเคมีจึง

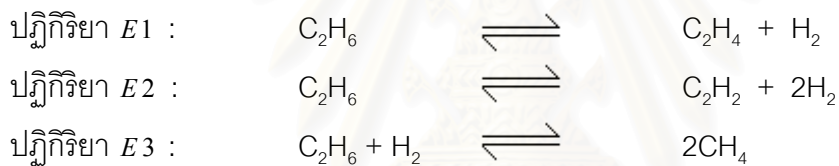
เป็นแนวทางหนึ่งเพื่อพิจารณาปริมาณจำกัดสำหรับการผลิตเอทิลีน โพรพิลีน และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอื่นๆ ซึ่งมักแปรเปลี่ยนไปเมื่ออุณหภูมิสำหรับระบบปฏิกิริยาข้างต้นเปลี่ยน

เมื่อระบบปฏิกิริยาหนึ่งเข้าสู่สภาวะสมดุลเคมีสัดส่วนการผลิตเอทิลีน หรือ โพรพิลีน และสารประกอบไฮโดรคาร์บอนอื่นๆ สามารถคำนวณได้จากสมการความสัมพันธ์ของสมดุลเคมีสำหรับปฏิกิริยาเคมีแต่ละปฏิกิริยาดังนี้

$$K_r(T) = \prod_{i=1}^C \left(\frac{y_i P}{RT} \right)^{\pm \nu_i} \quad r = 1, 2, 3, \dots, R \quad (1)$$

โดยที่ค่าคงที่ของสมดุลเคมี K_r สำหรับปฏิกิริยาเคมี r ขึ้นกับอุณหภูมิของระบบปฏิกิริยาเคมีเท่านั้น [24-25] ในขณะที่สัดส่วนการผลิตสำหรับสารประกอบไฮโดรคาร์บอนแต่ละชนิด (y_i) ยังคงได้รับอิทธิพลของทั้งอุณหภูมิและความดันของระบบปฏิกิริยาเคมีดังกล่าว

สำหรับการผลิตเอทิลีนจากอีเทนระบบปฏิกิริยาเคมี ของการผลิตประกอบด้วย



เมื่อกำหนดให้ m_{E1} , m_{E2} และ m_{E3} เป็นปริมาณของอีเทนที่เกิดปฏิกิริยา $E1$, $E2$ และ $E3$ ตามลำดับ และปฏิกิริยาเคมีทั้งสามเกิดสมดุลเคมี ณ อุณหภูมิ และความดันที่กำหนดไว้ ปริมาณของสารประกอบไฮโดรคาร์บอน และ ไฮโดรเจน สามารถคำนวณได้ตามสมการเคมีข้างต้น ดังที่สรุปไว้ในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 ปริมาณสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆที่เกิดขึ้น ณ สมดุลเคมีของระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทน

	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆
เริ่มต้น	-	-	-	-	F_{in}
ปฏิกิริยา $E1$	m_{E1}	-	-	m_{E1}	$-m_{E1}$
ปฏิกิริยา $E2$	$2m_{E2}$	-	m_{E2}	-	$-m_{E2}$
ปฏิกิริยา $E3$	$-m_{E3}$	$2m_{E3}$	-	-	$-m_{E3}$

เนื่องจากการเกิดปฏิกิริยาทำให้จำนวนโมลรวมของระบบอาจเพิ่มมากขึ้นหรือลดน้อยลง ดังนั้น จึงต้องคำนวณสัดส่วนโมลของสารประกอบแต่ละชนิด ณ สภาวะสมดุลเคมี โดยสัดส่วนโมลของสารประกอบแต่ละชนิดต้องสัมพันธ์กับปริมาณการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน ดังนี้

$$y_{H_2} = \frac{(m_{E1} + 2m_{E2} - m_{E3})}{(F_{in} + m_{E1} + 2m_{E2})} \quad (2)$$

$$y_{CH_4} = \frac{2m_{E3}}{(F_{in} + m_{E1} + 2m_{E2})} \quad (3)$$

$$y_{C_2H_2} = \frac{m_{E2}}{(F_{in} + m_{E1} + 2m_{E2})} \quad (4)$$

$$y_{C_2H_4} = \frac{m_{E1}}{(F_{in} + m_{E1} + 2m_{E2})} \quad (5)$$

$$y_{C_2H_6} = \frac{(F_{in} - m_{E1} - m_{E2} - m_{E3})}{(F_{in} + m_{E1} + 2m_{E2})} \quad (6)$$

และสัดส่วนโมลที่คำนวณในข้างต้นของสารประกอบทั้งหมด มีความสัมพันธ์กันตามสมการสมดุลเคมี(สมการ(1)) ดังนี้

$$K_{E1} = \left[\frac{y_{C_2H_4} y_{H_2}}{y_{C_2H_6}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right] \quad (7)$$

$$K_{E2} = \left[\frac{y_{C_2H_2} y_{H_2}^2}{y_{C_2H_6}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right]^2 \quad (8)$$

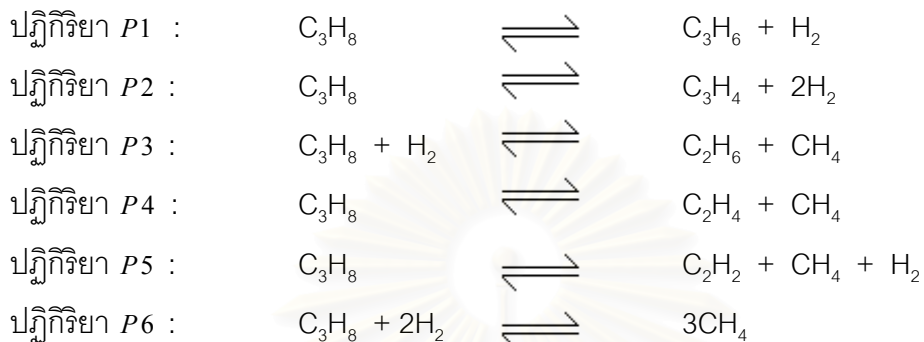
$$K_{E3} = \left[\frac{y_{CH_4}^2}{y_{C_2H_6} y_{H_6}} \right] \quad (9)$$

ดังนั้นระบบสมการจึงประกอบด้วย สมการสัดส่วนโมลของสารประกอบแต่ละชนิด (สมการที่ (2) – (6)) และ สมการสมดุลเคมี (สมการที่ (7) – (9)) ในขณะที่ตัวแปรของระบบสมการประกอบด้วย ปริมาณอีเทนที่เกิดปฏิกิริยาสำหรับแต่ละปฏิกิริยาเคมี (m_{Ei}) สัดส่วนโมลของสารประกอบ (y_i) อัตราการไหลของอีเทน (F_{in}) อุณหภูมิ และ ความดันของระบบปฏิกิริยา ระบบสมการดังกล่าว มีจำนวนตัวแปรมากกว่าจำนวนสมการเท่ากับ 3 จึงจำเป็นต้องกำหนดค่าตัวแปรเพิ่มเติมอีก 3 ตัวแปร นั่นคือ กำหนด อุณหภูมิ ความดัน และอัตราการไหลของอีเทนสำหรับการผลิตแบบ

ต่อเนื่องหรือปริมาณอีเทนเริ่มต้นสำหรับการผลิตแบบระบบปิด เพื่อให้เพียงพอสำหรับการหา
คำตอบ

ในการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนระบบปฏิกิริยาประกอบด้วยปฏิกิริยาเคมี

6 ปฏิกิริยาเคมี ดังนี้



กำหนดให้ $m_{P1}, m_{P2}, m_{P3}, m_{P4}, m_{P5}$ และ m_{P6} เป็นปริมาณของโพรเพนที่เกิดปฏิกิริยา
 $P1, P2, P3, P4, P5$ และ $P6$ ตามลำดับ โดยปฏิกิริยาเคมีทั้งหมดปฏิกิริยาถึงสมดุลเคมี ณ อุณหภูมิ
และความดันที่กำหนดไว้ ปริมาณของสารประกอบอื่นๆ สามารถคำนวณได้ตามสมการเคมี
ข้างต้น ดังที่สรุปไว้ในตารางที่ 2.2

ตารางที่ 2.2 ปริมาณการใช้และเกิดสารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างๆ ที่สมดุลเคมีของระบบ

ปฏิกิริยาของการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน

	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₂	C ₂ H ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₄	C ₃ H ₆	C ₃ H ₈
เริ่มต้น								F_{in}
ปฏิกิริยาที่ P1	m_{P1}	-	-	-	-	-	m_{P1}	$-m_{P1}$
ปฏิกิริยาที่ P2	$2m_{P2}$	-	-	-	-	m_{P2}	-	$-m_{P2}$
ปฏิกิริยาที่ P3	$-m_{P3}$	m_{P3}	-	-	m_{P3}	-	-	$-m_{P3}$
ปฏิกิริยาที่ P4	-	m_{P4}	-	m_{P4}	-	-	-	$-m_{P4}$
ปฏิกิริยาที่ P5	m_{P5}	m_{P5}	m_{P5}	-	-	-	-	$-m_{P5}$
ปฏิกิริยาที่ P6	$-3m_{P6}$	$2m_{P6}$	-	-	-	-	-	$-m_{P6}$

เนื่องจํานวนโมลรวมของระบบเปลี่ยนแปลงไปจากเดิมอันเป็นผลจากปฏิกิริยาเคมีข้างต้น จึงต้อง คํานวณสัดส่วนโมลของสารประกอบแต่ละชนิด ณ สภาวะสมดุลเคมี โดยสัดส่วนโมลของสาร ประกอบแต่ละชนิดต้องสัมพันธ์กับปริมาณการเกิดปฏิกิริยาของโพเพนดังนี้

$$y_{H_2} = \frac{(m_{P_1} + 2m_{P_2} - m_{P_3} + m_{P_5} - 3m_{P_6})}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (10)$$

$$y_{CH_4} = \frac{(m_{P_3} + m_{P_4} + m_{P_5} + 2m_{P_6})}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (11)$$

$$y_{C_2H_2} = \frac{m_{P_5}}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (12)$$

$$y_{C_2H_4} = \frac{m_{P_4}}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (13)$$

$$y_{C_2H_6} = \frac{m_{P_3}}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (14)$$

$$y_{C_3H_4} = \frac{m_{P_2}}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (15)$$

$$y_{C_3H_6} = \frac{m_{P_1}}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (16)$$

$$y_{C_3H_8} = \frac{(F_{in} - m_{P_1} - m_{P_2} - m_{P_3} - m_{P_4} - m_{P_5} - m_{P_6})}{(F_{in} + m_{P_1} + 2m_{P_2} + m_{P_4} + 2m_{P_5} - 2m_{P_6})} \quad (17)$$

และสัดส่วนโมลที่คํานวณได้ข้างต้นของสารประกอบทั้งหมดมีความสัมพันธ์กันตามสมการสมดุล เคมีดังนี้

$$K_{P_1} = \left[\frac{y_{C_3H_6} y_{H_2}}{y_{C_3H_8}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right] \quad (18)$$

$$K_{P_2} = \left[\frac{y_{C_3H_4} y_{H_2}^2}{y_{C_3H_8}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right]^2 \quad (19)$$

$$K_{P_3} = \left[\frac{y_{C_2H_6} y_{CH_4}}{y_{C_3H_8} z_{H_2}} \right] \quad (20)$$

$$K_{P4} = \left[\frac{y_{C_2H_4} y_{CH_4}}{y_{C_3H_8}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right] \quad (21)$$

$$K_{P5} = \left[\frac{y_{C_2H_2} y_{CH_4} y_{H_2}}{y_{C_3H_8}} \right] \left[\frac{P}{RT} \right]^2 \quad (22)$$

$$K_{P6} = \left[\frac{y_{CH_4}^2}{y_{C_3H_8} y_{H_2}} \right] \quad (23)$$

ดังนั้นระบบสมการจึงประกอบด้วย สมการสัดส่วนโมลของสารประกอบแต่ละชนิด (สมการที่ (10) – (17)) และสมการสมดุลเคมี (สมการที่ (18) – (23)) ในขณะที่ตัวแปรของระบบสมการประกอบด้วย ปริมาณโพรเพนที่เกิดปฏิกิริยาสำหรับแต่ละปฏิกิริยาเคมี (m_r) สัดส่วนโมลของสารประกอบ (y_i) อัตราการไหลของโพรเพน (F_{in}) อุณหภูมิ และความดันของระบบปฏิกิริยา ระบบสมการดังกล่าวมีจำนวนตัวแปรมากกว่าจำนวนสมการเท่ากับ 3 จึงจำเป็นต้องกำหนด ค่าตัวแปรเพิ่มเติมอีก 3 ตัวแปร นั่นคือ กำหนด อุณหภูมิ ความดัน และอัตราการไหลของโพรเพน เพื่อให้เพียงพอสำหรับการหาคำตอบ

ระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากอีเทนและโพรเพนตามลำดับนั้น เกิดขึ้นในสถานะแก๊สเท่านั้น เนื่องจากอุณหภูมิของปฏิกิริยาสูงกว่าอุณหภูมิวิกฤตของสารประกอบทั้งหมดในระบบปฏิกิริยาดังกล่าวข้างต้น ดังนั้นพลังงานอิสระของกิปส์รวมในระบบเท่ากับผลคูณของโมลรวมของสารประกอบในระบบกับค่าพลังงานอิสระของกิปส์ของสารผสมดังนี้

$$G_i = nG(T, P, n_i) \quad ; i = 1, 2, 3, \dots, C \quad (24)$$

$$n = \sum n_i \quad (25)$$

อนุพันธ์ของค่าพลังงานอิสระของกิปส์รวมของระบบเมื่อมีการเปลี่ยนอุณหภูมิ ความดันและปริมาณสารประกอบแสดงได้ดังนี้

$$d(G_i) = \left[\frac{\partial(nG)}{\partial T} \right]_{P,n} dT + \left[\frac{\partial(nG)}{\partial P} \right]_{T,n} dP + \sum_{i=1}^C \left[\frac{\partial(nG)}{\partial n_i} \right]_{T,P,n_{j \neq i}} dn_i \quad (26)$$

$$d(G_i) = \left[\frac{\partial(nG)}{\partial T} \right]_{P,n} dT + \left[\frac{\partial(nG)}{\partial P} \right]_{T,n} dP + \sum_{i=1}^C \bar{G}_i dn_i \quad (27)$$

ภายใต้เงื่อนไขสมดุลเคมี ณ อุณหภูมิ และความดันที่กำหนดไว้ สมการ(26)ลดเหลือเพียง

$$\sum_{i=1}^C \bar{G}_i dn_i = 0 \quad (28)$$

ปริมาณ dn_i อาจแทนได้ด้วยผลต่างของปริมาณของสารประกอบ i ณ สภาวะสมดุล กับปริมาณของสารประกอบนั้น ณ สภาวะเริ่มต้นก่อนเกิดปฏิกิริยา

การคำนวณโดยใช้หลักการพลังงานอิสระของกิบส์ต่ำที่สุด โดยมากใช้วิธีการคำนวณของลากรานจ์(Lagrange) ซึ่งเป็นการสร้างฟังก์ชันที่ผูกความสัมพันธ์พลังงานอิสระของระบบรวม กับ สมการอนุรักษ์อะตอมไว้ด้วยกัน โดยวิธีการของลากรานจ์มีดังนี้

1. สร้างชุดสมการอนุรักษ์มวลสารของแต่ละอะตอมธาตุในระบบ

$$\sum_{i=1}^C n_i a_{ik} = A_k \quad (29)$$

2. คูณค่าคงที่ของลากรานจ์ (λ_k) ตลอดสมการอนุรักษ์มวลสารแต่ละอะตอมธาตุ

$$\lambda_k \left(\sum_{i=1}^C n_i a_{ik} - A_k \right) = 0 \quad (30)$$

โดยที่ผลรวมของการคูณของทุกอะตอมธาตุมีค่าเป็น

$$\sum_k \lambda_k \left(\sum_{i=1}^C n_i a_{ik} - A_k \right) = 0 \quad (31)$$

3. กำหนดค่าฟังก์ชันขึ้นมาใหม่ (L) โดยให้มีความสัมพันธ์กับพลังงานอิสระกิบส์ของระบบ (G_i)

$$L = G_i + \sum_k \lambda_k \left(\sum_{i=1}^C n_i a_{ik} - A_k \right) \quad (32)$$

4. ค่าของฟังก์ชันที่น้อยที่สุดสามารถคำนวณได้จากอนุพันธ์ของฟังก์ชันเทียบกับปริมาณของสารประกอบแต่ละชนิด ดังนี้

$$\left(\frac{\partial L}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} = \left(\frac{\partial G_i}{\partial n_i} \right)_{T,P,n_j} + \sum_k \lambda_k a_{ik} = 0 \quad (33)$$

ทำให้ได้สมการสมดุลเคมี ที่เป็นวิธีการคำนวณปริมาณของสารประกอบแต่ละชนิดที่สมดุลเคมี จากพลังงานอิสระของกิปลส์สำหรับการเกิดสารประกอบชนิดนั้นๆ จากธาตุต่างๆที่เกี่ยวข้อง ดังนี้

$$\frac{\Delta G_{fi}^{\circ}}{RT} + \ln(y_i \hat{\phi}_i P) + \sum_{k=1}^{kc} \frac{\lambda_k}{RT} a_{ik} = 0 \quad ; i = 1, 2, 3, \dots, c \quad (34)$$

$$\text{เมื่อ} \quad y_i = \frac{n_i}{\sum_{i=1}^c n_i} \quad ; i = 1, 2, 3, \dots, c \quad (35)$$

ระบบสมการการผลิตเอนทัลปีจากอีเทนที่สมดุลเคมีซึ่งมีพลังงานอิสระรวมของระบบต่ำที่สุด จึงประกอบด้วยสมการพลังงานอิสระของแต่ละสารประกอบ

$$H_2: \quad \frac{\Delta G_{H_2}^{\circ}}{RT} + \ln(y_{H_2} \hat{\phi}_{H_2} P) + \frac{2\lambda_H}{RT} = 0 \quad (36)$$

$$CH_4: \quad \frac{\Delta G_{CH_4}^{\circ}}{RT} + \ln(y_{CH_4} \hat{\phi}_{CH_4} P) + \frac{\lambda_C}{RT} + \frac{4\lambda_H}{RT} = 0 \quad (37)$$

$$C_2H_2: \quad \frac{\Delta G_{C_2H_2}^{\circ}}{RT} + \ln(y_{C_2H_2} \hat{\phi}_{C_2H_2} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{2\lambda_H}{RT} = 0 \quad (38)$$

$$C_2H_4: \quad \frac{\Delta G_{C_2H_4}^{\circ}}{RT} + \ln(y_{C_2H_4} \hat{\phi}_{C_2H_4} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{4\lambda_H}{RT} = 0 \quad (39)$$

$$C_2H_6: \quad \frac{\Delta G_{C_2H_6}^{\circ}}{RT} + \ln(y_{C_2H_6} \hat{\phi}_{C_2H_6} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{6\lambda_H}{RT} = 0 \quad (40)$$

และสมการดุลมวลอะตอม

$$C: \quad n_{CH_4} + 2n_{C_2H_2} + 2n_{C_2H_4} + 2n_{C_2H_6} = 2F_{C_2H_6, in} \quad (41)$$

$$H: \quad 2n_{H_2} + 4n_{CH_4} + 2n_{C_2H_2} + 4n_{C_2H_4} + 6n_{C_2H_6} = 6F_{C_2H_6, in} \quad (42)$$

และสมการผลรวมสารประกอบ

$$\sum_{i=1}^c n_i = n_{H_2} + n_{CH_4} + n_{C_2H_2} + n_{C_2H_4} + n_{C_2H_6} \quad (43)$$

ตัวแปรของระบบสมการประกอบด้วย ปริมาณสารประกอบต่างๆที่สมดุลเคมี (n_i) ปริมาณรวมของสารประกอบในระบบที่สมดุลเคมี ($\sum_{i=1}^c n_i$) ตัวแปรที่เพิ่มขึ้นคือค่าลากรางจ์ของธาตุ k (λ_k)

อัตราการไหลเข้าของสารตั้งต้น ($F_{C_2H_6, in}$) อุณหภูมิ และความดันของระบบปฏิกิริยา ระบบ สมการดังกล่าวมีจำนวนตัวแปรมากกว่าจำนวนสมการคือ 3 จึงจำเป็นต้องกำหนดค่าตัวแปรเพิ่มเติมอีก 3 ตัวแปรคือ อุณหภูมิ ความดัน และอัตราการไหลเข้าของสารตั้งต้น

ในลักษณะเดียวกันระบบสมการคณิตศาสตร์สำหรับการผลิตโพรพิลีนจาก โพรเพนที่สมดุลเคมี จึงประกอบด้วยสมการพลังงานอิสระของแต่ละสารประกอบ

$$H_2: \frac{\Delta G_{H_2}^\circ}{RT} + \ln(y_{H_2} \hat{\phi}_{H_2} P) + \frac{2\lambda_H}{RT} = 0 \quad (44)$$

$$CH_4: \frac{\Delta G_{CH_4}^\circ}{RT} + \ln(y_{CH_4} \hat{\phi}_{CH_4} P) + \frac{\lambda_C}{RT} + \frac{4\lambda_H}{RT} = 0 \quad (45)$$

$$C_2H_2: \frac{\Delta G_{C_2H_2}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_2H_2} \hat{\phi}_{C_2H_2} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{2\lambda_H}{RT} = 0 \quad (46)$$

$$C_2H_4: \frac{\Delta G_{C_2H_4}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_2H_4} \hat{\phi}_{C_2H_4} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{4\lambda_H}{RT} = 0 \quad (47)$$

$$C_2H_6: \frac{\Delta G_{C_2H_6}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_2H_6} \hat{\phi}_{C_2H_6} P) + \frac{2\lambda_C}{RT} + \frac{6\lambda_H}{RT} = 0 \quad (48)$$

$$C_3H_4: \frac{\Delta G_{C_3H_4}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_3H_4} \hat{\phi}_{C_3H_4} P) + \frac{3\lambda_C}{RT} + \frac{4\lambda_H}{RT} = 0 \quad (49)$$

$$C_3H_6: \frac{\Delta G_{C_3H_6}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_3H_6} \hat{\phi}_{C_3H_6} P) + \frac{3\lambda_C}{RT} + \frac{6\lambda_H}{RT} = 0 \quad (50)$$

$$C_3H_8: \frac{\Delta G_{C_3H_8}^\circ}{RT} + \ln(y_{C_3H_8} \hat{\phi}_{C_3H_8} P) + \frac{3\lambda_C}{RT} + \frac{8\lambda_H}{RT} = 0 \quad (51)$$

สถาบันวิจัยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

และสมการดุลมวลอะตอม

$$C: n_{CH_4} + 2n_{C_2H_2} + 2n_{C_2H_4} + 2n_{C_2H_6} + 3n_{C_3H_4} + 3n_{C_3H_6} + 3n_{C_3H_8} = 3F_{C_3H_8} \quad (52)$$

$$H: n_{H_2} + n_{CH_4} + 2n_{C_2H_2} + 2n_{C_2H_4} + 2n_{C_2H_6} + 3n_{C_3H_4} + 3n_{C_3H_6} + 3n_{C_3H_8} = 8F_{C_3H_8} \quad (53)$$

และสมการผลรวมสารประกอบ

$$\sum_{i=1}^C n_i = n_{H_2} + n_{CH_4} + n_{C_2H_2} + n_{C_2H_4} + n_{C_2H_6} + n_{C_3H_4} + n_{C_3H_6} + n_{C_3H_8} \quad (54)$$

ตัวแปรของระบบสมการประกอบด้วย ปริมาณสารประกอบต่างๆที่ (n_i) ปริมาณรวมของสารประกอบในระบบ ($\sum_{i=1}^C n_i$) ตัวแปรที่สร้างเพิ่มคือค่าลากรางจ์ของธาตุ k (λ_k) อัตราการไหลเข้าของสารตั้งต้น ($F_{C_3H_8, in}$) อุณหภูมิ และความดันของระบบปฏิกิริยา ระบบสมการดังกล่าวมีจำนวนตัวแปรมากกว่าจำนวนสมการคือ 3 จึงจำเป็นต้องกำหนดค่าตัวแปรเพิ่มเติมอีก 3 ตัวแปร คือ อุณหภูมิ ความดัน และอัตราการไหลเข้าของสารตั้งต้น

เพื่อการเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลการทดลองและผลการคำนวณภายใต้เงื่อนไขอื่นๆ สมรรถนะของระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน ณ สมดุลเคมี เลือกเปรียบเทียบ สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน และ โพรเพน ตามลำดับ

$$X_{ethane} = \left[\frac{F_{ethane, in} - F_{ethane, out}}{F_{ethane, in}} \right] \quad (55)$$

$$X_{propane} = \left[\frac{F_{propane, in} - F_{propane, out}}{F_{propane, in}} \right] \quad (56)$$

และสัดส่วนของการผลิตเอทิลีน และ โพรพิลีน ตามลำดับ

$$Y_{ethylene} = \left[\frac{F_{ethylene, out}}{F_{ethane, in} + F_{propane, in}} \right] \quad (57)$$

$$Y_{propylene} = \left[\frac{F_{propylene, out}}{F_{propane, in}} \right] \quad (58)$$

นอกจากนี้ สัดส่วนการเกิดสารประกอบอื่นๆ ที่มีมวลโมเลกุลน้อยกว่ามวลโมเลกุลเอทิลีน ซึ่งเกิดขึ้นจากอีเทน และโพรเพน สามารถคำนวณได้เช่นเดียวกับ สัดส่วนการผลิตเอทิลีน (สมการที่ 57)



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทที่ 3

ผลผลิตเอทิลีนจากอีเทนผสมโพรเพน

การคำนวณปริมาณการผลิตเอทิลีนและสารประกอบอื่นๆภายใต้เงื่อนไขของ สมดุลเคมีที่มีปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้นมากกว่าหนึ่งปฏิกิริยาจากพลังงานอิสระของกิปส์ เป็นวิธีการที่ สะดวกกว่าการคำนวณจากค่าคงที่ของสมดุลเคมี นอกจากนี้การคำนวณสมดุลเคมีของระบบ ปฏิกิริยา สามารถคำนวณได้ด้วยโปรแกรมคำนวณสำหรับกระบวนการผลิตในอุตสาหกรรมเคมี เช่น Pro II/Provision หรือ Aspen plus เป็นต้น สำหรับงานวิจัยที่ได้เลือกใช้โปรแกรม Pro II /Provision สำหรับการคำนวณ และสมการอุณหพลศาสตร์ที่ใช้ในการคำนวณได้คัดเลือกสมการ โดยใช้ตารางแบ่งกลุ่มสมการอุณหพลศาสตร์ตามชนิดอุตสาหกรรมต่างๆที่อยู่ใน คู่มือการใช้ โปรแกรมสำเร็จ Aspen plus และ Pro II/Provision ดังนั้นสมการทางอุณหพลศาสตร์ที่ เหมาะสำหรับกลุ่มอุตสาหกรรมการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน ได้แก่ Soave-Redlich-Kwong(SRK) และ Peng-Robinson(PR) ซึ่งสามารถคำนวณความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปร สภาวะทางอุณหพลศาสตร์ เช่น พลังงานอิสระของกิปส์ เป็นต้น ช่วงอุณหภูมิ -268 ถึง 1727 องศาเซลเซียส และ ความดัน 0 ถึง 340 บรรยากาศ และสภาวะของการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน นอยู่ภายในช่วงดังกล่าว เมื่อนำสมการสภาวะทั้งสองใช้คำนวณการผลิตเอทิลีนจากอีเทน พบว่าค่าสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน และสัดส่วนการเกิดของสารประกอบต่างๆมีค่าเท่ากัน (ดูในตารางที่3.1) ดังนั้นจึงเลือกสมการหนึ่งจากสองสมการมาใช้คำนวณค่าตัวแปรสภาวะทาง ด้านอุณหพลศาสตร์ของแบบจำลอง ซึ่งในงานวิจัยนี้เลือกใช้สมการ Soave-Redlich-Kwong สำหรับการคำนวณค่าพลังงานอิสระของสารประกอบแต่ละชนิด ณ อุณหภูมิและความดันของ ระบบปฏิกิริยา

ตารางที่ 3.1 ผลการคำนวณการผลิตเอทิลีนจากอีเทนด้วยสมการ SRK และ PR

	SRK	PR
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	800
ความดัน (บรรยากาศ)	1.00	1.00
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.9997	0.9997
สัดส่วนการเกิด		
ไฮโดรเจน	0.0031	0.0031
มีเทน	0.5641	0.5641
อะเซทิลีน	0.0970	0.0970
เอทิลีน	0.3275	0.3275

3.1 การทดลองแบบจำลองระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทน

ระบบปฏิกิริยาเคมีของการผลิตเอทิลีนจากอีเทนประกอบด้วยปฏิกิริยา E_1 , E_2 และ E_3 ดังที่ได้เสนอมานในบทที่ 2 การคำนวณแบ่งออกเป็น 3 ระบบ ได้แก่

ระบบปฏิกิริยาเคมีที่มีเพียงปฏิกิริยา E_1 ซึ่งเป็นปฏิกิริยาเคมีหลักของระบบการผลิตเอทิลีนจากอีเทน

ระบบปฏิกิริยาเคมีที่ประกอบด้วยปฏิกิริยา E_1 และ E_2 ซึ่งเป็นปฏิกิริยาเคมีชนิดเดียวกันและสามารถเกิดขึ้นได้ต่อเนื่องกันดังที่ได้ แสดงไว้ในรูปที่ 2.1

ระบบปฏิกิริยาเคมี ที่มีทั้ง 3 ปฏิกิริยา ซึ่งประกอบด้วยปฏิกิริยา E_1 , E_2 และ E_3

เพื่อศึกษาผลของปฏิกิริยาเคมีต่อสัดส่วนการผลิตเอทิลีนจากอีเทน และเพื่อคัดเลือกระบบปฏิกิริยาเคมีที่เหมาะสมต่อการพยากรณ์ผลผลิตเอทิลีน ที่สอดคล้องกับการผลิตในอุตสาหกรรม

ข้อมูลของการทดลองผลิตเอทิลีนจากอีเทนจากงานวิจัยต่างๆ พบว่าความดันรวมของการทดลองหรือการดำเนินการแตกต่างกัน เนื่องด้วยได้ผสมไอน้ำสำหรับให้ความร้อนต่อระบบปฏิกิริยาเคมีในสัดส่วนที่แตกต่างกัน แต่เมื่อพิจารณาความดันย่อยของสารประกอบที่เกิดปฏิกิริยาเคมีได้จะมีค่าใกล้เคียงกัน อาทิเช่น การทดลองการผลิตเอทิลีนจากอีเทนพบว่าความดันย่อยของอีเทนมีค่า 1 และ 1.05 บรรยากาศ เมื่อคำนวณค่าสมรรถนะของแบบจำลองระบบปฏิกิริยาทั้งสามได้แก่ปฏิกิริยา E_1 , $E_1 + E_2$ และ $E_1 + E_2 + E_3$ ที่อุณหภูมิ 800

องศาเซลเซียสซึ่งเป็นอุณหภูมิที่ใช้สำหรับการผลิตเอทิลีนในอุตสาหกรรม เมื่อความดันเพิ่มขึ้นเล็กน้อย (ดังตารางที่ 3.2) ค่าสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (X_{ethane}) มีค่าลดลงเล็กน้อยเช่นกัน เนื่องจากระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนจากอีเทนเป็นปฏิกิริยาที่มีแนวโน้มเพิ่มจำนวนโมลรวมในระบบ อีกทั้งยังเป็นปฏิกิริยาที่ดำเนินอยู่ที่สถานะแก๊ส ส่วนค่าสัดส่วนการเกิดสารประกอบต่างๆจึงลดลงเนื่องจากปฏิกิริยาให้จำนวนโมลของแก๊สในระบบปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น เช่นปฏิกิริยา E_1, E_2 สำหรับปฏิกิริยาการเกิดมีเทน (E_3) ถึงแม้ว่าเป็นปฏิกิริยาที่ไม่ได้รับผลจากความดัน เพราะเป็นปฏิกิริยาที่มีจำนวนโมลรวมคงที่ แต่เมื่อสมดุลของปฏิกิริยา E_1, E_2 เปลี่ยนไปจากเดิมเมื่อเพิ่มความดันสูงขึ้นส่งผลให้มีเทนเกิดขึ้นในระบบการผลิตลดลงเล็กน้อยด้วยเช่นกัน

เมื่อพิจารณาผลของความดันทั้งสองกับค่าสมรรถนะของระบบปฏิกิริยาทั้งสาม พบว่าค่าสมรรถนะแตกต่างกันน้อยมาก ดังนั้นจึงสามารถเลือกความดันค่าใดก็ได้ แต่การผลิตเอทิลีนจากอีเทนเป็นระบบปฏิกิริยาที่มีผลให้จำนวนโมลรวมเพิ่มขึ้น จึงเลือกความดันย่อย 1 บรรยากาศ สำหรับการคำนวณการผลิตเอทิลีนจากอีเทนด้วยแบบจำลองระบบปฏิกิริยาดังกล่าว เพื่อให้สารตั้งต้นเกิดปฏิกิริยาได้มากที่สุด

ตารางที่ 3.2 ผลเปรียบเทียบผลของความดันต่อการผลิตเอทิลีนจากอีเทน

	E1		E1+E2		E1+E2+E3	
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	800	800	800	800	800
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.05	1.00	1.05	1.00	1.05
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.7409	0.7327	0.7425	0.7342	0.9916	0.9914
สัดส่วนการผลิต						
ไฮโดรเจน	0.0494	0.0488	0.0505	0.0499	0.0031	0.0030
มีเทน	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.5641	0.5637
อะเซทิลีน	0.0000	0.0000	0.0136	0.0129	0.0970	0.0954
เอทิลีน	0.6915	0.6838	0.6783	0.6714	0.3275	0.3293

ผลการคำนวณของแบบจำลองระบบปฏิกิริยาเคมีกับการทดลอง พบว่าสัดส่วนของการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน (X_{ethane}) เพิ่มมากขึ้นเมื่ออุณหภูมิของระบบปฏิกิริยาสูงขึ้น ซึ่งเป็นไปตามลักษณะของปฏิกิริยาชนิดดูดความร้อน(ดูตารางที่ 3.3) สำหรับระบบปฏิกิริยาเคมีเดี่ยว (E_1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาเคมีของอีเทนถูกจำกัดด้วยสมดุลเคมี ณ อุณหภูมิ และความดันของระบบปฏิกิริยาเคมี เมื่อระบบปฏิกิริยาเคมีมี 2 ปฏิกิริยา ($E_1 + E_2$) แม้ว่าสัดส่วนการ

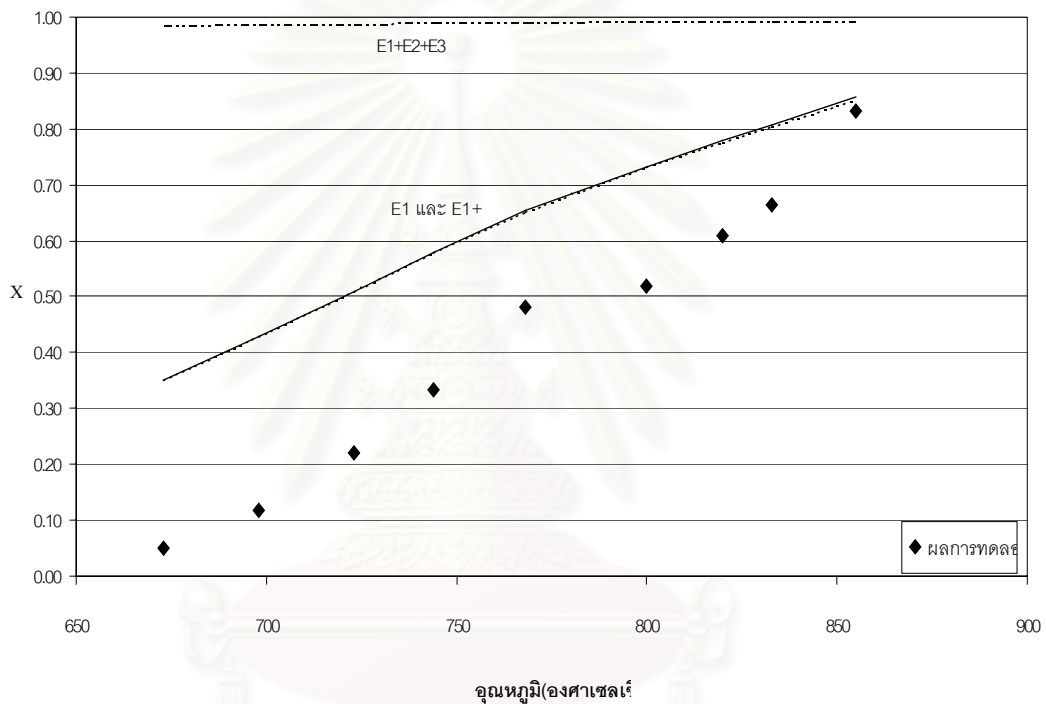
เกิดปฏิกิริยาเคมีของอีเทนยังคงเท่าเดิม ณ อุณหภูมิ และความดันเดียวกัน แต่สัดส่วนการผลิตเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) ลดลงเล็กน้อย (ดูตารางที่ 3.3) เนื่องจากเอทิลีนเกิดปฏิกิริยาต่อเนื่องเป็นอะเซทิลีนได้(ดังที่แสดงในรูปที่ 2.1) โดยที่อุณหภูมิและความดันของระบบปฏิกิริยาจำกัดสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาเคมีของอีเทน นั่นคือปฏิกิริยา E_1 เกิดขึ้นได้ดีกว่าปฏิกิริยา E_2 เนื่องจากปฏิกิริยา E_1 เป็นปฏิกิริยาเพิ่มจำนวนโมลรวมในระบบได้น้อยกว่าปฏิกิริยา E_2 ซึ่งเป็นไปตามหลักของเลอชาเตอลิเยร์

เมื่อระบบปฏิกิริยาเคมีของอีเทนมี 3 ปฏิกิริยา ($E_1 + E_2 + E_3$) พบว่าสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน (X_{ethane}) เพิ่มขึ้นมากกว่าของระบบปฏิกิริยา E_1 และ $E_1 + E_2$ จนเกือบสมบูรณ์ เนื่องจากสถานะของระบบปฏิกิริยาเกิดขึ้นอยู่ในสถานะแก๊สและ ปฏิกิริยา E_3 เป็นปฏิกิริยาที่มีจำนวนโมลรวมของปฏิกิริยาเท่าเดิม ปฏิกิริยา E_3 จึงไม่ได้รับผลกระทบจากความดัน สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน (X_{ethane}) เพิ่มสูงขึ้น (ดูตารางที่ 3.3) การเพิ่มปฏิกิริยา E_3 ในระบบปฏิกิริยามีผลทำให้สัดส่วนการผลิตเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) ลดลง ขณะที่ไฮโดรเจนซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ของจากทั้งปฏิกิริยา E_1 และ E_2 ถูกใช้ไปเพื่อทำปฏิกิริยากับอีเทนเป็นมีเทน จึงส่งผลให้อีเทนเกิดปฏิกิริยาเป็นอะเซทิลีนได้มากขึ้นหรือเอทิลีนเกิดปฏิกิริยาต่อเนื่องไปเป็นอะเซทิลีนได้มากขึ้น ดังนั้นสัดส่วนการผลิตเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) จึงลดลง ในขณะที่สัดส่วนการเกิดอะเซทิลีน ($Y_{acethylene}$) เพิ่มขึ้น

สมรรถนะของระบบปฏิกิริยาของทั้งสามแบบจำลองมีค่าแตกต่างกับการทดลอง เนื่องจากสมมุติฐานของแบบจำลองระบบปฏิกิริยาสภาวะการเกิดปฏิกิริยาอยู่ที่สมดุลเคมี แต่สภาวะของการทดลองยังดำเนินไปถึงสมดุลเคมี แต่ผลของการทดลองมีค่าเข้าใกล้สมดุลเคมีมากยิ่งขึ้นเมื่ออุณหภูมิของระบบปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นซึ่งส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีตามความสัมพันธ์ของอาร์เรเนียส จึงมีผลทำให้ค่าสมรรถนะของการทดลองเข้าใกล้ผลการคำนวณของแบบจำลองระบบปฏิกิริยาเพิ่มมากขึ้น(ดังรูปที่ 3.1 และตารางที่ 3.3) นอกจากนี้ยังพบว่าสัดส่วนการเกิดมีเทน ($Y_{methane}$) ของระบบปฏิกิริยา $E_1 + E_2 + E_3$ ที่คำนวณได้มีค่าสูงกว่าสัดส่วนการเกิดมีเทน ($Y_{methane}$) ของผลการทดลองอย่างมาก (ดูจากตารางที่ 3.1) ทั้งนี้เป็นผลจากอัตราการเกิดมีเทนช้ากว่าอัตราการเกิดเอทิลีนมาก ๆ นั่นเอง กล่าวคือภายในช่วงเวลาจำกัดเช่น 1 วินาทีหรือ น้อยกว่า อีเทนมักจะเกิดเป็นเอทิลีนและอะเซทิลีน โดยที่ยังไม่เกิดเป็นมีเทนแก๊สผสมที่ออกจากเครื่องปฏิกรณ์ถูกลดอุณหภูมิลงจนไม่อาจเกิดปฏิกิริยาได้อีก แม้ว่าอัตราการเกิดมีเทนช้ากว่าเอทิลีนมาก ๆ แต่ที่สมดุลเคมีพบว่า มีเทนเกิดขึ้นได้มากกว่าเอทิลีนมาก ๆ เมื่อพิจารณาปฏิกิริยา E_3 ในระบบปฏิกิริยา ทำให้สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน ($X_{ethylene}$) มีค่าเพิ่มมากขึ้นจนเกือบสมบูรณ์ ดังนั้นเมื่อไม่พิจารณาปฏิกิริยา E_3 ซึ่งเทียบเท่ากับมีเทนไม่เกิด

ขึ้น จึงมีผลให้ผลการคำนวณด้วยสมมูลเคมีได้ใกล้เคียงกับผลการทดลอง และอาจให้ผลคำนวณที่เป็นขอบเขตของการผลิตเอทิลีนได้เช่นกัน

เมื่อเปรียบเทียบผลการคำนวณของแบบจำลองระบบปฏิกิริยา E_1 และ $E_1 + E_2$ กับการทดลอง ทั้งสองแบบจำลองสามารถคำนวณให้ค่าที่ไม่แตกต่างกัน แต่แบบจำลองระบบปฏิกิริยา $E_1 + E_2$ สามารถใช้อธิบายการเกิดของสารประกอบในระบบปฏิกิริยาได้มากกว่าระบบปฏิกิริยา E_1 ดังนั้นระบบปฏิกิริยา ($E_1 + E_2$) จึงเป็นแบบจำลองระบบปฏิกิริยาที่จะนำไปใช้สำหรับการพยากรณ์การผลิตเอทิลีนจากอีเทนต่อไป



รูปที่ 3.1 สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทนที่ความดันบรรยากาศ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 3.3 ผลการผลิตเอทิลีนและสารประกอบอื่นๆ จากอีเทน

	การทดลอง									E1								
	673	698	723	744	768	800	820	833	855	673	698	723	744	768	800	820	833	855
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	673	698	723	744	768	800	820	833	855	673	698	723	744	768	800	820	833	855
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.50	1.50	1.50	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
มวลไอน้ำต่อมวลวัตถุดิบ	-	-	-	-	-	0.30	0.30	0.30	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ระยะเวลา(วินาที)	2.5200	2.3700	2.1700	1.8800	1.6600	0.7370	0.7160	0.7040	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.05	0.12	0.22	0.33	0.48	0.52	0.61	0.66	0.83	0.35	0.43	0.51	0.58	0.65	0.73	0.78	0.80	0.85
สัดส่วนการผลิต																		
ไฮโดรเจน	0.0033	0.0077	0.0142	0.0216	0.0315	0.0352	0.0419	0.0459	0.0593	0.0235	0.0287	0.0341	0.0387	0.0437	0.0487	0.0518	0.0536	0.0569
มีเทน	0.0005	0.0018	0.0048	0.0111	0.0259	0.0324	0.0522	0.0677	0.1127	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
อะเซทิลีน	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0001	0.0015	0.0026	0.0035	0.0153	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
เอทิลีน	0.0457	0.1084	0.2003	0.2999	0.4235	0.4470	0.5120	0.5459	0.6453	0.3269	0.3991	0.4750	0.5390	0.6087	0.6821	0.7256	0.7507	0.7961

ตารางที่ 3.3 (ต่อ) ผลการผลิตเอทิลีนและสารประกอบอื่นๆ จากอีเทน

	E1+E2									E1+E2+E3								
	673	698	723	744	768	800	820	833	855	673	698	723	744	768	800	820	833	855
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	673	698	723	744	768	800	820	833	855	673	698	723	744	768	800	820	833	855
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
มวลไอน้ำต่อมวลวัตถุดิบ	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
ระยะเวลา(วินาที)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.35	0.43	0.51	0.58	0.65	0.73	0.78	0.81	0.86	0.98	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99	0.99
สัดส่วนการผลิต																		
ไฮโดรเจน	0.0235	0.0288	0.0344	0.0391	0.0443	0.0498	0.0534	0.0556	0.0600	0.0005	0.0008	0.0011	0.0015	0.0020	0.0030	0.0038	0.0045	0.0059
มีเทน	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.5469	0.5515	0.5558	0.5589	0.5619	0.5638	0.5642	0.5638	0.5620
อะเซทิลีน	0.0007	0.0013	0.0024	0.0040	0.0069	0.0127	0.0187	0.0237	0.0379	0.0417	0.0507	0.0607	0.0698	0.0808	0.0960	0.1067	0.1140	0.1287
เอทิลีน	0.3262	0.3978	0.4728	0.5352	0.6022	0.6694	0.7068	0.7267	0.7582	0.3955	0.3834	0.3704	0.3589	0.3455	0.3286	0.3175	0.3103	0.2970

3.2 การทดสอบแบบจำลองระบบปฏิบัติการการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน

ระบบปฏิบัติการเคมีของการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนประกอบด้วยปฏิบัติการ P_1, P_2, P_3, P_4, P_5 และ P_6 ยกเว้นปฏิบัติการ P_3 และ P_6 ปฏิบัติการอื่นๆทำให้มีจำนวนโมลรวมของแก๊สผสมเพิ่มมากขึ้น ในขณะที่บางปฏิบัติการอาจเกิดขึ้นได้ช้ามากเมื่อเปรียบเทียบกับปฏิบัติการเคมีอื่นๆ ดังนั้นภายในช่วงเวลาจำกัด สารประกอบของปฏิบัติการเคมีที่เกิดช้าจึงเกิดขึ้นได้น้อยเมื่อพิจารณาเลียนแบบระบบปฏิบัติการการผลิตเอทิลีนจากอีเทน ปฏิบัติการ P_2 และ P_5 ซึ่งทำให้เกิดสารประกอบในกลุ่มของแอลกอฮอล์และทำให้จำนวนโมลรวมเพิ่มขึ้นมากกว่าปฏิบัติการเคมีอื่นๆ และปฏิบัติการ P_3 ซึ่งเกิดอีเทน น่าจะเป็นปฏิบัติการที่เกิดขึ้นได้ช้า นอกจากนี้ อะเซทิลีน อีเทน โพรพาไดอินหรือ โพรไพนในปฏิบัติการ P_5, P_3 และ P_2 ตามลำดับ เกิดขึ้นได้น้อยมากในการศึกษาทดลอง[21] ดังนั้นระบบปฏิบัติการการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนจึงแบ่งออกเป็นระบบปฏิบัติการดังนี้

1. ระบบปฏิบัติการที่หนึ่ง ไม่พิจารณาอะเซทิลีนและโพรพาไดอินเกิดในระบบ สารประกอบทั้งสองจัดอยู่ในกลุ่มสารประกอบที่ไม่อิ่มตัวมากกว่าสารประกอบโอเลฟินส์ ซึ่งพบว่าเกิดขึ้นน้อยในการทดลอง ระบบปฏิบัติการซึ่งประกอบด้วยปฏิบัติการ P_1, P_3, P_4 และ P_6
2. ระบบปฏิบัติการที่สอง ไม่พิจารณาการเกิดอีเทนจากโพรเพน ซึ่งเกิดขึ้นได้น้อยในการทดลอง ระบบปฏิบัติการประกอบด้วยปฏิบัติการ P_1, P_2, P_4, P_5 และ P_6
3. ระบบปฏิบัติการที่สาม ไม่พิจารณาการเกิดอีเทน อะเซทิลีน และโพรพาไดอินในระบบ ปฏิบัติการประกอบด้วยปฏิบัติการ P_1, P_4 และ P_6
4. ระบบปฏิบัติการที่สี่ประกอบด้วยปฏิบัติการ P_1 ถึง P_6 ทั้ง 6 ปฏิบัติการเคมี

เพื่อศึกษาผลของปฏิบัติการเคมีอื่นต่อสัดส่วนการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากโพรเพน และเพื่อคัดเลือกระบบปฏิบัติการเคมีที่เหมาะสมต่อการพยากรณ์ผลผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน ที่สอดคล้องกับการผลิตในอุตสาหกรรม

ในลักษณะเดียวกับข้อมูลของการผลิตเอทิลีนจากอีเทน แหล่งข้อมูลของการผลิต โพรพิลีนจากโพรเพนมาจากหลายแหล่งข้อมูลที่สภาวะดำเนินการภายใต้ความดันรวมที่แตกต่างกัน และผสมไอน้ำด้วยสัดส่วนที่แตกต่างกัน เพื่อให้ความร้อนแก่ระบบปฏิกิริยาเคมี ดังนั้นจึงพิจารณาเปรียบเทียบผลของความดันย่อยของสารประกอบที่เกิดปฏิกิริยาเคมีได้สำหรับการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน พบว่าความดันย่อยของโพรเพนมีค่า 0.34 0.996 ,1 และ 1.02 บรรยากาศ ความดันย่อยที่มีค่าใกล้เคียงกันเช่นความดันย่อย 0.996 1 และ 1.02 ค่าสมรรถนะของแบบจำลองที่คำนวณได้มีค่าใกล้เคียงกัน ดังนั้นอิทธิพลของความดันต่อการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากโพรเพนที่ควรพิจารณาคือ 0.34 และ 1 บรรยากาศ เมื่อความดันเพิ่มขึ้นสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพนคงเดิม เนื่องจากระบบปฏิกิริยาของโพรเพนเป็นปฏิกิริยาชนิดดูดความร้อน โพรเพนจึงเกิดปฏิกิริยาได้สมบูรณ์ ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส แต่ความดันมีผลต่อสัดส่วนการเกิดสารประกอบต่างๆ ดังสรุปในตารางที่ 3.4 ระบบปฏิกิริยาของโพรเพนทำให้จำนวนโมลรวมเพิ่มมากขึ้น ดังนั้นจึงเลือกการคำนวณที่ความดัน 0.34 บรรยากาศ ซึ่งจะให้ผลโพรเพนเกิดปฏิกิริยาได้มากกว่าการคำนวณที่ความดันบรรยากาศ สำหรับการเปรียบเทียบกับผลการทดลอง

ตารางที่ 3.4 ผลเปรียบเทียบความดันของการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนที่ 800 องศาเซลเซียส

	P1+P3+P4+P6		P1+P2+P4+P5+P6		P1+P4+P6		P1-P6	
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	800	800	800	800	800	800	800
ความดัน(บรรยากาศ)	0.34	1.00	0.34	1.00	0.34	1.00	0.34	1.00
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการผลิต								
ไฮโดรเจน	0.0023	0.0014	0.0042	0.0022	0.0023	0.0015	0.0042	0.0022
มีเทน	0.3429	0.3484	0.4476	0.4292	0.3450	0.3519	0.4454	0.4256
อะเซทิลีน	0.0000	0.0000	0.1789	0.1202	0.0000	0.0000	0.1786	0.1200
เอทิลีน	0.5287	0.4675	0.3007	0.3264	0.5302	0.4697	0.2996	0.3244
อีเทน	0.0041	0.0068	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0038	0.0067
โพรพาไดอิน	0.0000	0.0000	0.0189	0.0233	0.0000	0.0000	0.0189	0.0232
โพรพิลีน	0.1219	0.1756	0.0496	0.0985	0.1223	0.1766	0.0494	0.0977

สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน ($X_{propane}$) เกิดขึ้นได้เกือบสมบูรณ์ในช่วงอุณหภูมิมากกว่า 760 องศาเซลเซียส ซึ่งเป็นลักษณะของปฏิกิริยาเคมีเป็นชนิดดูดความร้อน (ดูรูปที่ 1.2 สำหรับปฏิกิริยาเคมีเดี่ยว และรูปที่ 3.2 สำหรับระบบปฏิกิริยาต่างๆ) ดังนั้นอุณหภูมิของระบบปฏิกิริยาจึงไม่มีผลกระทบต่อสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน ($X_{propane}$) แต่ยังคงให้ผลต่อการเพิ่มอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีได้ จึงมีผลให้สัดส่วนการผลิตเอทิลีน โพรพิลีน และสารประกอบอื่นๆเปลี่ยนแปลงไป ดังผลการทดลองที่ได้สรุปในตารางที่ 3.5 และสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน ($X_{propane}$) ของการทดลองที่มีช่วงเวลาในการเกิดปฏิกิริยานานกว่า 1 วินาที มีค่าใกล้เคียงกับการคำนวณของแบบจำลองที่สมดุลเคมี มากกว่าการทดลองที่มีช่วงเวลาในการเกิดปฏิกิริยาน้อยกว่า 1 วินาที เนื่องจากการเพิ่มระยะเวลาในการเกิดปฏิกิริยาเคมีมีส่วนช่วยทำให้ปฏิกิริยาเคมีเข้าใกล้สภาวะสมดุลเคมีได้

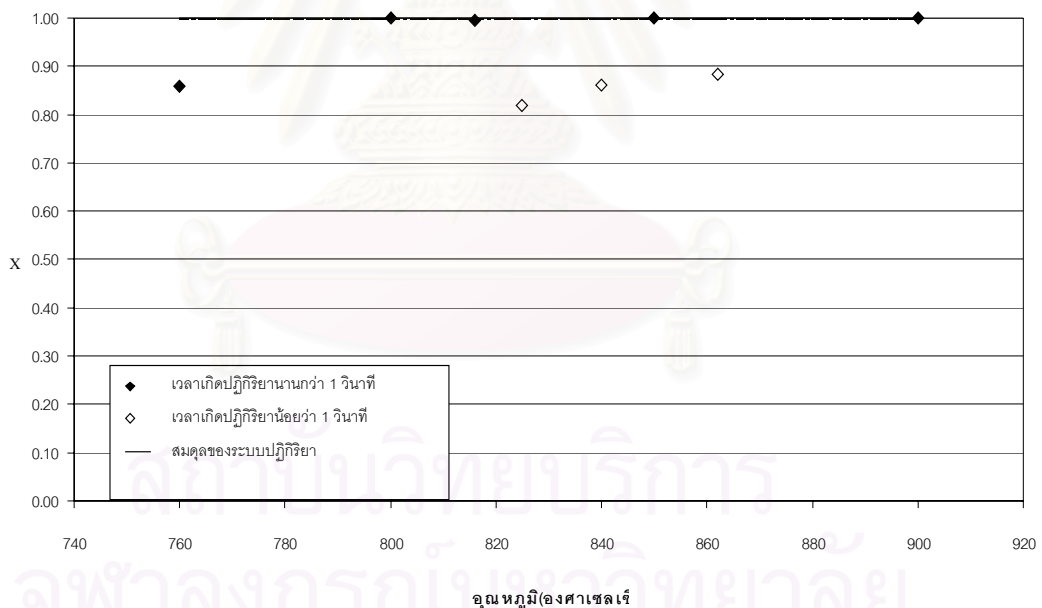
เมื่อพิจารณาผลของปฏิกิริยา P_2 กับ P_5 ต่อสัดส่วนการเกิดของผลิตภัณฑ์ต่างๆ โดยเปรียบเทียบกับระบบปฏิกิริยาที่ตัดกลุ่มไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (ปฏิกิริยา $P_1 + P_3 + P_4 + P_6$) กับระบบปฏิกิริยาทุกปฏิกิริยา (ปฏิกิริยา $P_1 - P_6$) พบว่าสัดส่วนการผลิตของเอทิลีนและโพรพิลีนอื่น ($Y_{ethylene}$ และ $Y_{propylene}$) มีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อไม่พิจารณาปฏิกิริยา P_2 กับ P_5 (ดังรูปที่ 3.3 และ 3.4 กับตารางที่ 3.5) การไม่พิจารณาปฏิกิริยา P_2 กับ P_5 มีผลทำให้อะเซทิลีนและโพรพาไดอินในระบบปฏิกิริยาไม่เกิดขึ้น ส่งผลให้เอทิลีน โพรพิลีนที่เกิดขึ้นไม่เกิดปฏิกิริยาต่อตาม que แสดงไว้ในรูปที่ 2.2 เอทิลีน และโพรพิลีนจึงเหลือมากขึ้น

พิจารณาผลของปฏิกิริยา P_3 ต่อสัดส่วนการเกิดของผลิตภัณฑ์ต่างๆ โดยเปรียบเทียบกับระบบปฏิกิริยาที่ไม่พิจารณาการเกิดอีเทน (ปฏิกิริยา $P_1 + P_2 + P_4 + P_5 + P_6$) กับระบบปฏิกิริยาทุกปฏิกิริยา (ปฏิกิริยา $P_1 - P_6$) พบว่าค่าสัดส่วนการผลิตของเอทิลีนและโพรพิลีนแตกต่างกันน้อยมาก (ดังรูปที่ 3.3 และ 3.4 กับตารางที่ 3.5) การไม่พิจารณาปฏิกิริยาการเกิดอีเทนจากระบบปฏิกิริยาไม่ผลให้อีเทนไม่เกิดขึ้น และ ทำให้โพรเพนไม่เกิดปฏิกิริยาเป็นอีเทน ดังนั้นโพรเพนที่ควรเกิดปฏิกิริยาเป็นอีเทนจะเกิดเป็นสารประกอบอื่นๆ ทำให้สารประกอบอื่นๆมีปริมาณเพิ่มขึ้น แต่อีเทนที่เกิดขึ้นนั้นในระบบเกิดขึ้นได้น้อยมาก (ดังตารางที่ 3.5) จึงทำให้ปริมาณสารประกอบอื่นๆที่เกิดขึ้นเปลี่ยนแปลงได้น้อยมาก

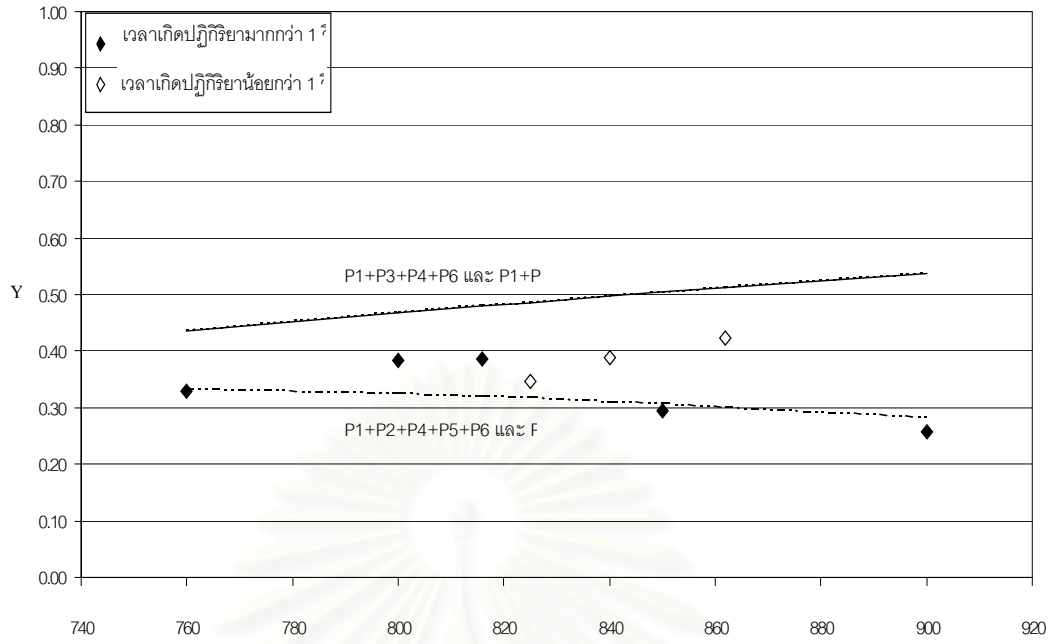
พิจารณาผลของปฏิกิริยา P_2, P_3 และ P_5 ต่อสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของสารประกอบโดยเปรียบเทียบกับระบบปฏิกิริยาที่ตัด อะเซทิลีน และ โพรพาไดอิน ปฏิกิริยา $(P_1 + P_3 + P_4 + P_6)$ พบว่าค่าสมรรถนะมีค่าใกล้เคียงกันมากเนื่องจากผลของการตัดปฏิกิริยา P_3 จากระบบปฏิกิริยามีผลต่อการเปลี่ยนปริมาณสารประกอบต่างๆในระบบน้อยมาก

จากการพิจารณาค่าสัดส่วนการผลิตเอทิลีนและโพรพิ

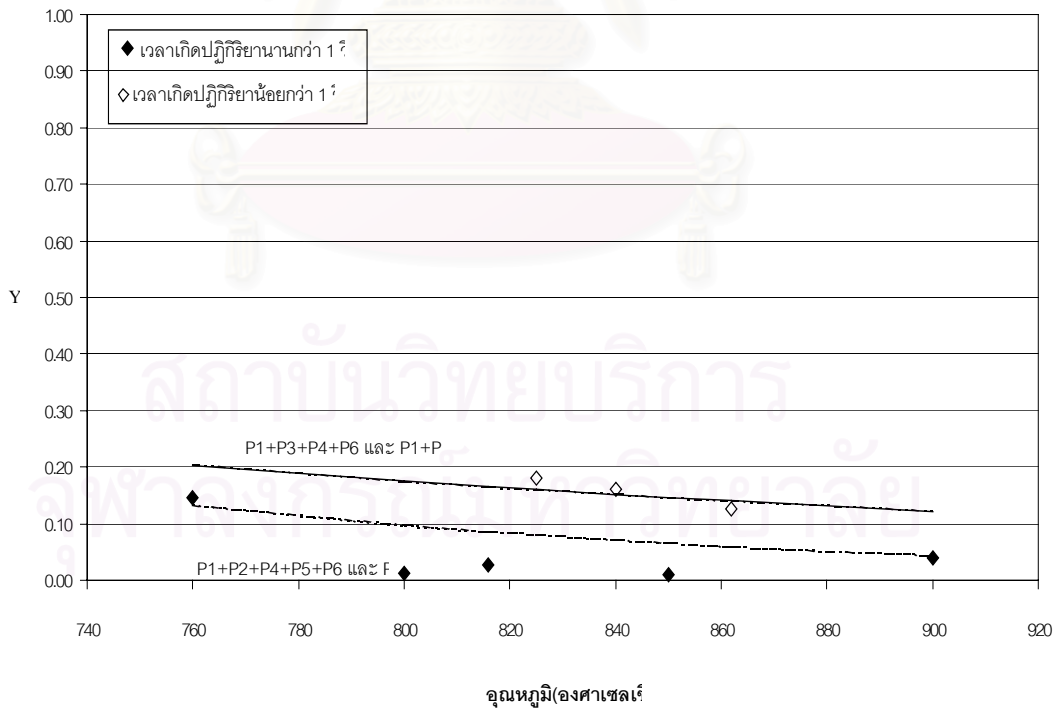
ลีน ($Y_{ethylene}, Y_{propylene}$) ของทุกแบบจำลองเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ผลการคำนวณของแบบจำลองระบบปฏิกิริยาทุกปฏิกิริยา ($P_1 - P_6$) กับ ระบบปฏิกิริยาที่ไม่พิจารณาการเกิดอีเทนจากระบบปฏิกิริยา ($P_1 + P_2 + P_4 + P_5 + P_6$) มีแนวโน้มและให้ค่าที่ใกล้เคียง โดยเมื่อพิจารณาทั้งสองระบบปฏิกิริยาคำนวณให้ผลการคำนวณที่ใกล้เคียงกัน แต่ระบบปฏิกิริยาทุกปฏิกิริยาสามารถคำนวณชนิดของสารประกอบที่เกิดขึ้นในระบบปฏิกิริยาได้มากกว่าของระบบปฏิกิริยาที่ไม่พิจารณาการเกิดอีเทนในระบบปฏิกิริยา ดังนั้นแบบจำลองที่เลือกใช้พยากรณ์การผลิตโพรพิลีนจากโพรเพนคือระบบปฏิกิริยาทุกปฏิกิริยา ($P_1 - P_6$)



รูปที่ 3.2 สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพนที่ความดัน 0.34 บรรยากาศ



อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)
รูปที่ 3.3 สัดส่วนการผลิตเอททิลีนที่ความดัน 0.34 บรรยากาศ



อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)
รูปที่ 3.4 สัดส่วนการผลิตโพรพิลีนที่ความดัน 0.34 บรรยากาศ

ตารางที่ 3.5 ผลการผลิตเอทิลีน โพรพิลีนและสารประกอบอื่นๆจากโพรเพน

	ผลการทดลอง								P1+P3+P4+P6							
	760	800	816	825	840	850	862	900	760	800	816	825	840	850	862	900
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	760	800	816	825	840	850	862	900	760	800	816	825	840	850	862	900
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.00	0.996	1.45	1.45	1.00	1.45	1.00	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
มวลไอน้ำต่อมวลป้อนเข้า	-	0.66	-	0.3	0.3	0.66	0.3	0.66	-	-	-	-	-	-	-	-
เวลา(วินาที)	4.21	3.40	4.45	0.72	0.71	3.10	0.64	1.50	-	-	-	-	-	-	-	-
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.86	1.00	0.99	0.82	0.86	1.00	0.88	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการผลิต																
ไฮโดรเจน	0.0162	0.0470	0.0308	0.0094	0.0093	0.0751	0.0079	0.0833	0.0015	0.0023	0.0027	0.0030	0.0034	0.0038	0.0042	0.0058
มีเทน	0.2891	0.5070	0.4921	0.2165	0.2396	0.5659	0.2611	0.5330	0.3490	0.3429	0.3398	0.3378	0.3343	0.3317	0.3283	0.3159
อะเซทิลีน	0.0103	0.0283	0.0067	0.0033	0.0058	0.0275	0.0081	0.0716	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
เอทิลีน	0.3294	0.3838	0.3872	0.3468	0.3895	0.2939	0.4230	0.2570	0.4995	0.5287	0.5396	0.5456	0.5554	0.5619	0.5695	0.5935
อีเทน	0.0670	0.0218	0.0504	0.0523	0.0480	0.0265	0.0496	0.0165	0.0048	0.0041	0.0039	0.0038	0.0035	0.0034	0.0033	0.0028
โพรพาไดอิน	0.0000	0.0000	0.0000	0.0029	0.0037	0.0000	0.0039	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
โพรพิลีน	0.1459	0.0122	0.0271	0.1814	0.1603	0.0111	0.1251	0.0385	0.1450	0.1219	0.1139	0.1097	0.1032	0.0992	0.0946	0.0820

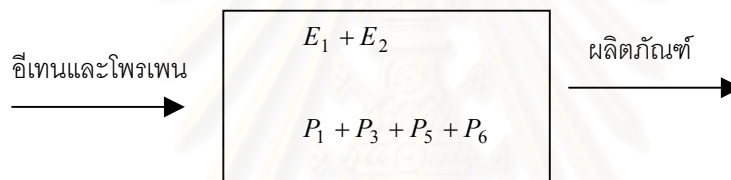
ตารางที่ 3.5 (ต่อ) ผลการผลิตเอทิลีน โพรพิลีนและสารประกอบอื่นๆจากโพรเพน

	P1+P2+P4+P5+P6								P1+P4+P6							
	760	800	816	825	840	850	862	900	760	800	816	825	840	850	862	900
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	760	800	816	825	840	850	862	900	760	800	816	825	840	850	862	900
ความดัน(บรรยากาศ)	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34	0.34
มวลไอน้ำต่อมวลป้อนเข้า	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
เวลา(วินาที)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการผลิต																
ไฮโดรเจน	0.0025	0.0042	0.0052	0.0058	0.0069	0.0078	0.0090	0.0136	0.0015	0.0023	0.0027	0.0030	0.0034	0.0038	0.0042	0.0058
มีเทน	0.4401	0.4476	0.4488	0.4490	0.4485	0.4474	0.4455	0.4335	0.3515	0.3450	0.3417	0.3397	0.3361	0.3334	0.3299	0.3172
อะเซทิลีน	0.1429	0.1789	0.1938	0.2024	0.2170	0.2269	0.2392	0.2809	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
เอทิลีน	0.3218	0.3007	0.2913	0.2858	0.2766	0.2703	0.2627	0.2386	0.5012	0.5302	0.5411	0.5471	0.5569	0.5633	0.5709	0.5948
อีเทน	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
โพรพาไดอิน	0.0207	0.0189	0.0181	0.0177	0.0169	0.0164	0.0159	0.0141	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
โพรพิลีน	0.0718	0.0496	0.0427	0.0393	0.0341	0.0310	0.0277	0.0192	0.1456	0.1223	0.1143	0.1101	0.1035	0.0995	0.0949	0.0822

3.3 การผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน

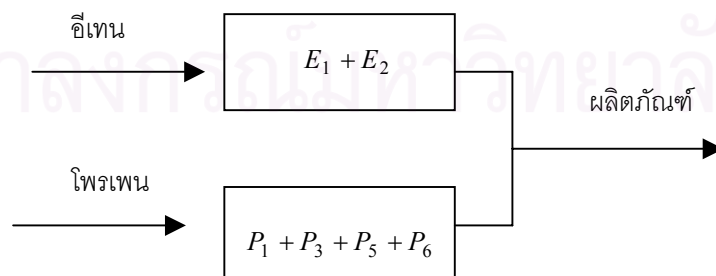
ระบบปฏิกริยาการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน จึงประกอบด้วยระบบปฏิกริยาการผลิตเอททิลีนจากอีเทน(ปฏิกริยา E_1 และ E_2) และระบบปฏิกริยาการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน (ปฏิกริยา $P_1 - P_6$)

การพยากรณ์ปริมาณการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สธรรมชาติผสมดังกล่าวสามารถคำนวณได้จากสมดุลเคมีของปฏิกริยาเคมีทั้ง 6 ปฏิกริยาเคมี ตามลักษณะของการผลิตที่เกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์เคมีเดียวกัน ดังรูปที่ 3.5



รูปที่3.5 การคำนวณระบบปฏิกริยาของอีเทนและโพรเพนพร้อมกัน

หรืออาจคำนวณสมดุลเคมีของระบบปฏิกริยาของอีเทนแยกจากการคำนวณสมดุลเคมีของระบบปฏิกริยาของโพรเพนแล้วจึงนำผลผลิตมาผสมกันในภายหลัง ซึ่งเปรียบเทียบกับกระบวนการผลิตประกอบด้วยปฏิกรณ์เคมี 2 เครื่อง ดังแสดงในรูปที่3.6



รูปที่3.6 การคำนวณระบบปฏิกริยาของอีเทนแยกจากระบบปฏิกริยาของโพรเพน

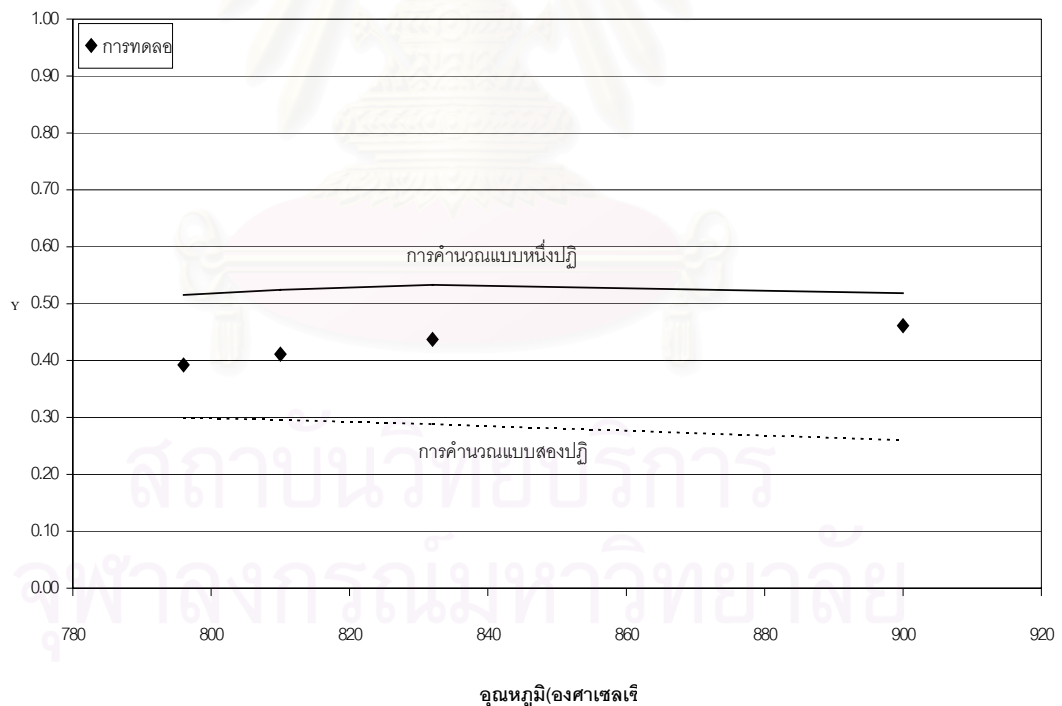
สำหรับการเปรียบเทียบวิธีการคำนวณทั้งสองวิธีกับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแนฟธา ซึ่งมักประกอบด้วยพาราฟินส์ แนฟทีน และอโรแมติกส์ โดยที่อัตราส่วนของอะตอมคาร์บอนต่ออะตอมไฮโดรคาร์บอนมักมีค่าไม่เกิน 2 ดังนั้นแก๊สอีเทนผสมโพรเพนที่มีอัตราส่วนอะตอมคาร์บอนต่ออะตอมไฮโดรเจนใกล้เคียงกับแนฟตามากที่สุดคือแก๊สผสมที่มีปริมาณอีเทนและโพรเพนอย่างละครึ่งหรือมีโพรเพนผสมร้อยละ 50 โดยมวล

จากข้อมูลของแนฟธาสำหรับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนความดันย่อยของข้อมูลมีสองค่าคือ 0.75 และ 0.98 บรรยากาศ การเพิ่มความดันมีผลต่อการเพิ่มขึ้นของเอทิลีนและโพรพิลีนในแบบจำลองที่ปฏิกิริยาเกิดขึ้นพร้อมกัน และผลต่อการลดลงของเอทิลีนและเพิ่มขึ้นของโพรพิลีนในแบบจำลองที่ปฏิกิริยาเกิดขึ้นแยกกัน(ดังตารางที่3.6) เนื่องจากระบบปฏิกิริยาของอีเทน มีผลต่อการเพิ่มปริมาณโมลรวมของแก๊สน้อยกว่าระบบปฏิกิริยาของโพรเพนเมื่อคำนวณระบบปฏิกิริยาทั้งสองพร้อมกัน จึงทำให้โพรเพนเกิดเป็นเอทิลีนได้มากขึ้นแม้จะเพิ่มความดันของระบบให้สูงขึ้น ในขณะที่เมื่อคำนวณแยกกันโพรเพนเกิดเป็นเอทิลีนได้น้อยลงเมื่อเพิ่มความดัน ผลลัพธ์รวมจึงได้ผลผลิตเอทิลีนรวมลดลง โดยปกติแล้วที่ความดันย่อยต่ำกว่าจะให้ปริมาณผลิตภัณฑ์สำหรับการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนมากกว่าดังนั้นจึงเลือกใช้ความดันย่อย 0.75 บรรยากาศ สำหรับการพยากรณ์การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน และสำหรับการเปรียบเทียบผลกับการทดลองผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแนฟธา

ตารางที่ 3.6 ผลเปรียบเทียบความดันของการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนที่ 800 องศาเซลเซียส

	หนึ่งปฏิกรณ์		สองปฏิกรณ์	
	800	800	800	800
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	800	800	800
ความดัน(บรรยากาศ)	0.75	0.98	0.75	0.98
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน	0.99	0.99	0.78	0.74
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการผลิต				
ไฮโดรเจน	0.0031	0.0027	0.0283	0.0265
มีเทน	0.4935	0.4895	0.2158	0.2130
อะเซทิลีน	0.1085	0.0966	0.0766	0.0674
เอทิลีน	0.2988	0.3017	0.5182	0.5027
โพรพาไดอิน	0.0338	0.0347	0.0222	0.0230
โพรพิลีน	0.1453	0.1694	0.0823	0.0964

สัดส่วนการเกิดของสารประกอบต่างๆของระบบปฏิกิริยาเปรียบเทียบกับการทดลองพบว่า สัดส่วนของการผลิตเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) และสารประกอบอื่นๆ ยกเว้นโพรพิลีนของระบบปฏิกิริยาแยกเกิดตามชนิดสารตั้งต้นนั้นมีค่ามากกว่า ผลการทดลอง (ดังรูปที่ 3.7 และตารางที่ 3.7) แต่สัดส่วนของการเกิดผลิตเอทิลีน โพรพิลีนและไฮโดรเจน ($Y_{ethylene}$ $Y_{propylene}$ และ $Y_{hydrogen}$) ของระบบปฏิกิริยาที่เกิดพร้อมกันนั้นมีค่าน้อยกว่าการทดลอง ยกเว้นในสารประกอบชนิดอื่นๆ จากลักษณะของการคำนวณด้วยของสมดุลเคมี สารประกอบที่เกิดขึ้นนั้นควรมีปริมาณมากกว่าที่ได้จากการทดลอง ยกเว้นสารประกอบที่เกิดขึ้นระหว่างกลางเช่น โพรพิลีน (ดังรูปที่ 2.2) การคำนวณระบบปฏิกิริยาที่เกิดโดยแบ่งแยกตามชนิดของสารตั้งต้นนั้นให้ผลสอดคล้องกับผลการทดลองได้ดีกว่าการคำนวณระบบปฏิกิริยาเกิดขึ้นพร้อมกัน ดังนั้นสำหรับการพยากรณ์แบบจำลองระบบปฏิกิริยาการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพนนั้นจะใช้ การคำนวณระบบปฏิกิริยาของ อีเทนแยกจากระบบปฏิกิริยาของโพรเพน



รูปที่ 3.7 การผลิตเอทิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพนที่มีมวลโพรเพนร้อยละ 50 ที่ความดัน 0.75 บรรยากาศ

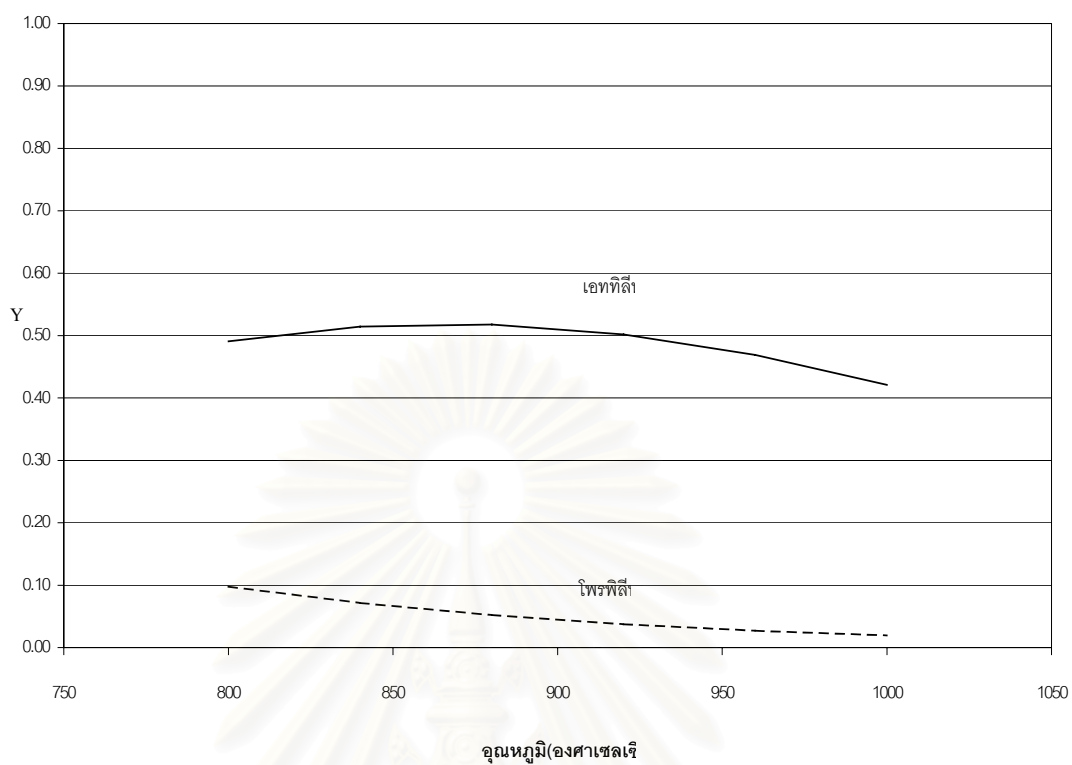
ตารางที่ 3.7 การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพนที่มีมวลโพรเพนร้อยละ 50 ที่ความดัน 0.75 บรรยากาศ

	การทดลอง				หนึ่งปฏิกรณ์				สองปฏิกรณ์			
	796	810	832	900	796	810	832	900	796	810	832	900
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	796	810	832	900	796	810	832	900	796	810	832	900
ความดัน(บรรยากาศ)	1.25	1.25	1.25	0.98	0.75	0.75	0.75	0.75	0.75	0.75	0.75	0.75
มวลไอน้ำต่อมวลวัตถุดิบ	0.4	0.4	0.4	-	-	-	-	-	-	-	-	-
สัดส่วนการผลิต												
ไฮโดรเจน	0.0114	0.0124	0.0140	0.0147	0.0030	0.0036	0.0046	0.0098	0.0279	0.0293	0.0316	0.0392
มีเทน	0.2352	0.2480	0.2690	0.2198	0.4929	0.4947	0.4963	0.4898	0.2153	0.2169	0.2189	0.2193
อะเซทิลีน	0.0022	0.0030	0.0049	0.0121	0.1056	0.1156	0.1321	0.1890	0.0743	0.0827	0.0976	0.1614
เอทิลีน	0.3923	0.4114	0.4371	0.4611	0.2998	0.2958	0.2884	0.2598	0.5153	0.5243	0.5330	0.5185
โพรพาไดอิน	0.0026	0.0031	0.0040	0.0174	0.0339	0.0336	0.0328	0.0295	0.0223	0.0219	0.0211	0.0182
โพรพิลีน	0.2779	0.2470	0.2014	0.2225	0.1499	0.1344	0.1129	0.0652	0.0851	0.0759	0.0633	0.0357

ส่วนผสมของแก๊สอีเทน-โพรเพน สำหรับการศึกษาค่าผลของอุณหภูมิของระบบปฏิกิริยา โพรเพนในแก๊สผสมมีร้อยละ 52.60 โดยมวล ซึ่งเป็นส่วนผสมที่มีปริมาณโพรเพนมากที่สุด ในแก๊สอีเทนผสมโพรเพนจากแก๊สธรรมชาติ (ดูจากตารางที่ 1.1) ผลการคำนวณระบบปฏิกิริยาของอีเทนแยกจากระบบปฏิกิริยาโพรเพน ค่าสัดส่วนการผลิตของเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) เพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิเพิ่มขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 800 – 880 องศาเซลเซียส และลดลงเมื่อเพิ่มอุณหภูมิสูงกว่า 880 องศาเซลเซียส (ดังรูปที่ 3.8 และตารางที่ 3.8) ค่าสัดส่วนการผลิตของเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) จากระบบปฏิกิริยาของอีเทน เพิ่มขึ้นได้สูงสุดที่อุณหภูมิ 880 องศาเซลเซียสเช่นกัน ในขณะที่สัดส่วนการผลิตเอทิลีนจากโพรเพนลดลงอย่างต่อเนื่องเมื่ออุณหภูมิเกิน 800 องศาเซลเซียส (ตารางที่ 3.9) เนื่องจากช่วงอุณหภูมิ 800 – 880 องศาเซลเซียสสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาอีเทน (X_{ethane}) เพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น มีผลทำให้เกิดสารประกอบต่างๆ เพิ่มขึ้นรวมทั้งเอทิลีน เอทิลีนสามารถเปลี่ยนเป็นอะเซทิลีนได้ (ดังรูปที่ 2.1) ที่อุณหภูมิของระบบปฏิกิริยาสูงกว่า 880 องศาเซลเซียส สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาอีเทน (X_{ethane}) เพิ่มขึ้นอย่างต่อเนื่องจนเกือบสมบูรณ์ และเนื่องจากเอทิลีนเปลี่ยนเป็นอะเซทิลีนได้มากขึ้น ดังนั้นสัดส่วนการผลิตของเอทิลีน ($Y_{ethylene}$) จึงลดลง ค่าสัดส่วนการผลิตของโพรพิลีน ($Y_{propylene}$) ลดลงเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น (ดังในรูปที่ 3.8 และตารางที่ 3.8) เนื่องจากค่าสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน (X_{ethane}) มีค่าคงที่และ โพรพิลีนที่เกิดขึ้นสามารถเปลี่ยนต่อไปเป็น อะเซทิลีน และไฮโดรเจน ดังสรุปในตารางที่ 3.9

ตารางที่ 3.8 การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน

อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	840	880	920	960	1000
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาอีเทน	0.74	0.83	0.89	0.93	0.96	0.98
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาโพรเพน	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการผลิต						
ไฮโดรเจน	0.0249	0.0290	0.0330	0.0375	0.0430	0.0496
มีเทน	0.2256	0.2300	0.2321	0.2309	0.2258	0.2163
อะเซทิลีน	0.0700	0.0941	0.1252	0.1658	0.2178	0.2814
เอทิลีน	0.4908	0.5142	0.5176	0.5019	0.4687	0.4211
โพรพาไดอิน	0.0231	0.0221	0.0205	0.0189	0.0171	0.0155
โพรพิลีน	0.0976	0.0715	0.0519	0.0375	0.0269	0.0193



รูปที่ 3.8 สัดส่วนการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สเอทิลีนออกไซด์ผสมโพรเพน

ที่มีมวลโพรเพนร้อยละ 52.60 ณ ความดันบรรยากาศ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

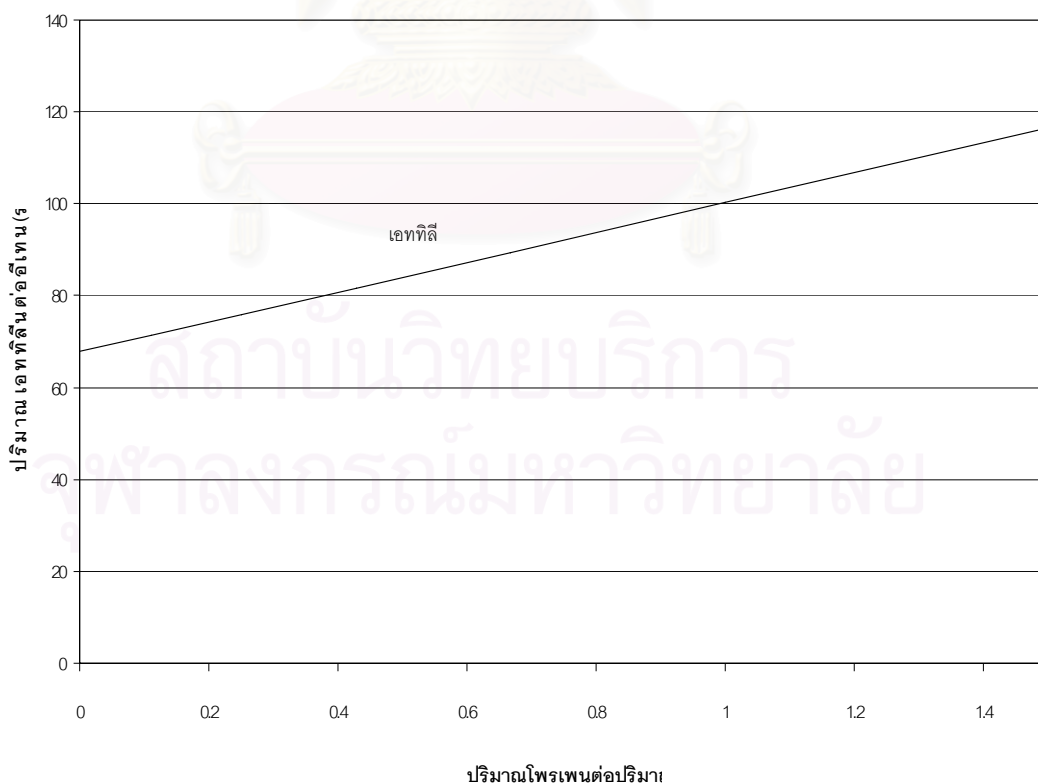
ตารางที่ 3.9 การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพนค่าสมรรถนะแต่ละปฏิกรณ์

เมื่อเพิ่มโพรเพนในแก๊สอีเทนผสมโพรเพนร้อยละ 52.60 โดยมวล ณ ความดันบรรยากาศ

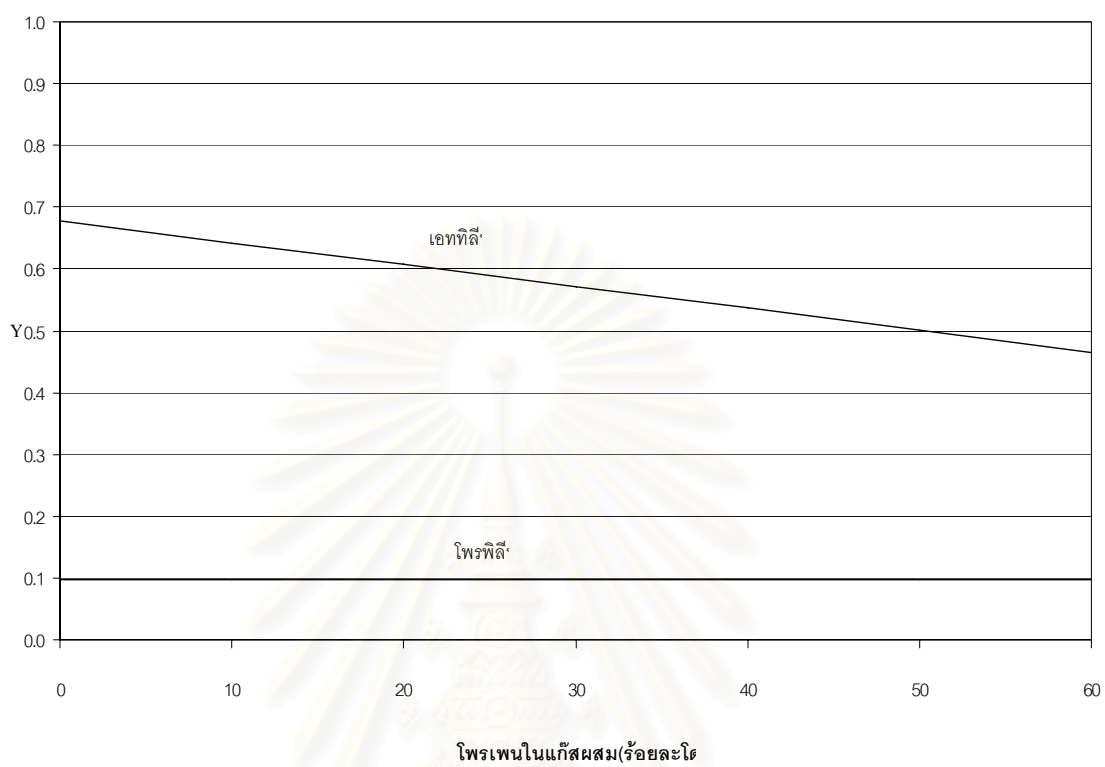
โพรเพนในแก๊สอีเทนผสมโพรเพน(ร้อยละโดยมวล)	52.60		52.60		52.60		52.60		52.60		52.60	
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800		840		880		920		960		1000	
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00		1.00		1.00		1.00		1.00		1.00	
สารตั้งต้นของปฏิกรณ์	อีเทน	โพรเพน	อีเทน	โพรเพน	อีเทน	โพรเพน	อีเทน	โพรเพน	อีเทน	โพรเพน	อีเทน	โพรเพน
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา	0.74	1.00	0.83	1.00	0.89	1.00	0.93	1.00	0.96	1.00	0.98	1.00
สัดส่วนการผลิต												
ไฮโดรเจน	0.0505	0.0022	0.0576	0.0036	0.0638	0.0057	0.0700	0.0087	0.0768	0.0130	0.0845	0.0186
มีเทน	0.0000	0.4256	0.0000	0.4340	0.0000	0.4379	0.0000	0.4355	0.0000	0.4259	0.0000	0.4080
อะเซทิลีน	0.0136	0.1200	0.0291	0.1517	0.0571	0.1856	0.1025	0.2219	0.1683	0.2617	0.2535	0.3061
เอทิลีน	0.6784	0.3244	0.7434	0.3110	0.7706	0.2933	0.7598	0.2733	0.7133	0.2518	0.6371	0.2297
โพรพาไดอิน	0.0000	0.0231	0.0000	0.0222	0.0000	0.0206	0.0000	0.0189	0.0000	0.0172	0.0000	0.0156
โพรพิลีน	0.0000	0.0978	0.0000	0.0716	0.0000	0.0520	0.0000	0.0376	0.0000	0.0270	0.0000	0.0193

สำหรับการศึกษาผลของสัดส่วนการผสมโพรเพนในแก๊สเอเทนผสม โพรเพน สภาวะสำหรับการดำเนินการที่ใช้คือ 800 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ ซึ่งเป็นสภาวะที่ใช้ การผลิตเอทิลีนในอุตสาหกรรม และสามารถผลิตโพรพิลีนได้มากกว่าอุณหภูมิสูงกว่า 800 องศาเซลเซียส

การเพิ่มปริมาณโพรเพนในแก๊สเอเทนผสมโพรเพนสามารถเพิ่มปริมาณเอทิลีนที่เกิดขึ้นในปฏิกิริยาได้ (ดังรูปที่ 3.9 และตารางที่ 3.10) แต่การเพิ่มปริมาณโพรเพนนอกจากเอทิลีนที่เพิ่มขึ้นจากโพรเพนส่งผลให้สัดส่วนการผลิตเอทิลีนจากเอเทนผสมโพรเพน ($Y_{ethylene}$) ลดลง (ดังรูปที่ 3.10 และตารางที่ 3.10) ในขณะที่สัดส่วนการผลิตโพรพิลีนยังคงไม่เปลี่ยนแปลง เนื่องจากจากโพรเพนเกิดปฏิกิริยาเป็นเอทิลีนได้เป็นสัดส่วนการผลิตเพียงร้อยละ 32.44 และเกิดเป็นโพรพิลีนได้ร้อยละ 9.78 ณ อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียส แม้ว่าการเพิ่มปริมาณโพรเพนจะมีผลให้ปริมาณเอทิลีนเพิ่มมากขึ้น แต่ปริมาณของสารประกอบอื่นๆที่เกิดจากโพรเพนมีค่าเพิ่มมากขึ้นด้วย เนื่องจากสัดส่วนสมดุลการผลิตสารประกอบอื่นๆ จากโพรเพนมีค่าคงที่ ดังที่สรุปในตารางที่ 3.9



รูปที่ 3.9 ผลการเพิ่มโพรเพนต่อปริมาณผลิตภัณฑ์ ณ 800 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ



รูปที่ 3.10 สัดส่วนการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน
ณ 800 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตารางที่ 3.10 การผลิตเอทิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพนแสดงค่าสมรรถนะ
แต่ละปฏิกรณ์เมื่ออุณหภูมิของระบบปฏิกิริยา 800 องศาเซลเซียส ความดันบรรยากาศ

โพรเพนในสารตั้งต้น(ร้อยละมวล)	0	10	20	30	40	50	60
มวลอีเทน	100	100	100	100	100	100	100
มวลโพรเพน	0.00	11.11	25	42.85	66.67	100	150
มวลรวม	100	111.11	125	142.85	166.67	200	250
อุณหภูมิ(องศาเซลเซียส)	800	800	800	800	800	800	800
ความดัน(บรรยากาศ)	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของอีเทน	0.74	0.74	0.74	0.74	0.74	0.74	0.74
สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของโพรเพน	-	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
มวล							
ไฮโดรเจน	5.08	5.11	5.14	5.18	5.23	5.30	5.41
มีเทน	0.00	4.73	10.64	18.24	28.38	42.58	63.86
อะเซทิลีน	1.36	2.69	4.35	6.49	9.35	13.35	19.34
เอทิลีน	67.81	71.41	75.92	81.71	89.43	100.24	116.46
อีเทน	25.75	25.83	25.92	26.04	26.20	26.42	26.75
โพรพาไดอิน	0.00	0.26	0.58	0.99	1.54	2.32	3.47
โพรพิลีน	0.00	1.09	2.44	4.19	6.51	9.77	14.66
โพรเพน	0.00	0.00	0.01	0.01	0.02	0.03	0.04
สัดส่วนการผลิต							
ไฮโดรเจน	0.0508	0.0460	0.0411	0.0362	0.0314	0.0265	0.0217
มีเทน	0.0000	0.0426	0.0852	0.1277	0.1703	0.2129	0.2555
อะเซทิลีน	0.0136	0.0242	0.0348	0.0455	0.0561	0.0667	0.0774
เอทิลีน	0.6781	0.6427	0.6073	0.5720	0.5366	0.5012	0.4658
โพรพาไดอิน	0.0000	0.0232	0.0231	0.0232	0.0231	0.0232	0.0232
โพรพิลีน	0.0000	0.0977	0.0978	0.0977	0.0977	0.0977	0.0977

บทที่ 4

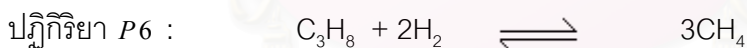
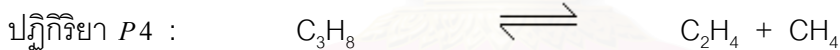
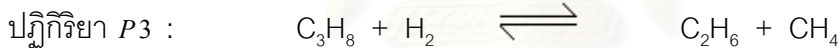
สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

4.1 สรุปผลการวิจัย

1. ระบบปฏิกิริยาสำหรับการพยากรณ์สมดุลการผลิตเอททิลีนจากอีเทนประกอบ
ด้วยปฏิกิริยา



2. ระบบปฏิกิริยาสำหรับการพยากรณ์สมดุลการผลิตโพรพิลีนจากโพรเพน
ประกอบด้วยปฏิกิริยา



3. การคำนวณสมดุลการผลิตเอททิลีนและโพรพิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน
ควรคำนวณสมดุลเคมีของระบบปฏิกิริยาของอีเทน แยกจากสมดุลเคมีของระบบปฏิกิริยาของ
โพรเพน

4. การผลิตเอททิลีนจากแก๊สอีเทนผสมโพรเพน ที่อุณหภูมิ 800 องศาเซลเซียสจะ
ได้ปริมาณเอททิลีน เพิ่มขึ้นร้อยละ 32.44 ของโพรเพนที่ผสมในอีเทน และสามารถผลิตโพรพิลีน
ได้เพียงร้อยละ 9.77 ของโพรเพนที่ผสมในอีเทน

5. สำหรับแก๊สอีเทนผสมโพรเพนที่มีโพรเพนร้อยละ 52.60 โดยมวล สัดส่วน
สมดุลการผลิตของเอททิลีนมีค่าสูงสุดที่ร้อยละ 51.76 ณ อุณหภูมิ 880 องศาเซลเซียส

4.2 ข้อเสนอแนะ

แนวทางในการศึกษาแบบจำลองระบบปฏิบัติการผลิตเอทิลีนและโพรพิลีน ควรศึกษาต่อเพิ่มเติมโดยการเพิ่มปฏิริยาในระบบปฏิริยา ซึ่งปฏิริยาที่เพิ่มควรเป็นปฏิริยา การเกิดสารประกอบที่มีมวลโมเลกุลมากกว่าสารตั้งต้น โดยอาจพิจารณาการเลือกชนิดสาร ประกอบดังกล่าว จากรายงานผลการศึกษาวิจัยที่ผ่านมา และอาจเพิ่มเติมชนิดสารประกอบจาก การคำนวณความเป็นไปได้ทางอุณหพลศาสตร์



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการอ้างอิง

1. ดร. วีรพจน์ ลือประสิทธิ์สกุล. ความรู้เกี่ยวกับอุตสาหกรรมปิโตรเคมีและการพัฒนาอุตสาหกรรมปิโตรเคมีในประเทศไทย. 1200 เล่ม. พิมพ์ครั้งที่ 1. พิมพ์ บางรัก : เดียร์บุ๊ก, 2535.
2. Harold , A. ,W. and Bryan , G. , R.. Industrial organic chemicals. USA :John Wiley & Sons, 1996.
3. Ludwig ,K ; Olaf ,W. and Karl ,S.Ethylene keystone to The petrochemical industry. USA.
4. Marshall .Chemicals from ethylene.USA:Noyes development corporation
5. Paushkin. Ya. M. and Vishnyakova .T.P. The Production of Olefins-containing and fuel gases.Bratrain :Pergamon press Ltd,1964
6. Thailand Petroleum and petroleum products Market (1996 - 2007).Petroleum institute Of thailand.Third edition : 2000.
7. Hydrocarbon Processing Nov 1985 : 134-137
8. Hydrocarbon Processing Nov 1987 : 74,86.
9. Hydrocarbon Processing Nov 1989 : 102,111.
10. Hydrocarbon Processing March 1991 : 155,185.
11. Hydrocarbon Processing March 1993 : 180-182,208.
12. Hydrocarbon Processing March 1995 : 116-122,144.
13. Hydrocarbon Processing March 1997 : 127-133.
14. Hydrocarbon Processing March 1999 : 112-114,142-143.
15. Williamson .K.D. and Davis .H.G. Mechanistic studies of ethane pyrolysis at low pressure,Industrial and Laboratory Pyrolyses,52-71.USA:1976
16. J. J. Dunkleman and L.F. Albright. Surface Effect During pyrolysis of ethane in tubular flow reactor ,Industrial and Laboratory Pyrolyses,241-260 .USA:1976
17. Lyle ,F.,A.; Billy ,L.,C and William ,H., C.. Pyrolysis theory and industrial practice. USA : ACADEMIC PRESS, Inc, 1983
18. Sundaram. K.M. and Froment .G.F. Kinetics of coke deposition in the thermal cracking of propane. Chem Eng Sci 1979 Vol34 : 635-644.
19. Forment .G.F. Thermal cracking for olefins production Fundamentals and their application to industrial problem. Chem Eng Sci 1981 Vol36 : 1271-1282

20. Kirk ,R.E.,and Othermer ,D.F. Kirk Othmer encyclopedia of chemical technology.
Vol 9 ,3 rd ,USA:John Wiley & Sons,1978
21. Nowowiejski. G.B. and Petterson. W.C. . Co-cracking of ethane and naphtha in
milliisecond. AIChE May 1982 : 49-51.
22. Grantom, R. L., and Royer, D. J. Ethylene. In W. Gerhartz, Y. S. Yamamoto,
L.Kaudy, J. F. Rounsaville, and G. Schulz (eds.), Ullmann's encyclopedia of
industrial chemistry, 45-93. Germany: VCH, 1987
23. Wittcoff. H.A. and Reuben. B.G .Industrial organic chemicals.USA:John Wiley
&Sons,inc 1996
24. Vanness. H.C. and Abbott. M.M.Classical thermodynamincs of non electrolyte
solutions.McGraw-Hill Book Company
25. เกริกชัย สุภาชงันจที. อุณหพลศาสตร์สำหรับอุตสาหกรรมซีพีไอ. โรงพิมพ์จุฬาลงกรณ์
มหาวิทยาลัย, 2538



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ประวัติผู้เขียน

นาย ปิยะศักดิ์ บุญนคร เกิดในเดือน สิงหาคม พ.ศ. 2521 ที่จังหวัดกรุงเทพมหานคร สำเร็จการศึกษาจากกรมการศึกษานอกโรงเรียน ในปีการศึกษา 2538 และ สำเร็จการศึกษา ระดับปริญญาตรี วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2542 และเข้าศึกษาต่อในภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย