บทที่ 4

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

โปรแกรมจำลองกระบวนการหอดูดซึมและหอฟื้นฟูสภาพ งานนี้ได้พัฒนางานขึ้นมาสองส่วนใหญ่ๆคือ

ส่วนที่ 1 เป็นโปรแกรมสำหรับหอดูดซึมคาร์บอนไดออกไซด์โดยสารละลายเอมีน แบบจำลองใช้กระบวนการในการคำนวณคล้ายแบบขั้นตอนสมดุล โอเวนและแมดดอกซ์(Owen-Maddox) ซึ่งเป็นระบบในการคำนวณที่เข้าใจง่ายและเป็นที่ยอมรับอย่างกว้างขวาง แต่มีการปรับปรุงในกระบวนในการนำสมการการถ่ายเทมวลข้ามวัฏภาคเข้ามาประยุกต์ใช้ร่วมกับค่าการละลายของเฉพาะคาร์บอนไดออกไซด์ในหอดูดซึมนอกจากนี้ยังได้เปลี่ยนแปลงขั้นตอนตรวจสอบต่างๆในโปรแกรมเพื่อให้ถูกต้องและใกล้เคียงมากยิ่งขึ้น ในส่วนขั้นตอนสมดุลพลังงานจะต้องกำหนดอุณหภูมิขาเข้าอุณหภูมิขาออกในสายของเหลวจะปล่อยให้ สมดุลพลังงานคำนวณหาค่าอุณหภูมิที่ทำให้ ผลต่างของพลังงานเข้าและออกน้อยที่สุด อย่างไรก็ตามในการคำนวณสมดุลพลังงานนั้นต้องคำนึงถึงค่าพลังงานจากปฏิกิริยาซึ่งในที่นี้มีค่าอยู่ประมาณ 62,000 Kj/mole เป็นพลังงานในรูป คายความร้อน

ส่วนที่ 2 เป็นโปรแกรมสำหรับหอฟื้นฟูสภาพเพื่อนำสารละลายเอมีนนำกลับไปใช้ใหม่โปรแกรมนี้ใช้หลักการในการคำนวณแบบขั้นตอนสมดุลเช่นเดียวกัน แต่จะมีโปรแกรมขนาดใหญ่ซ้อนอยู่ในโปรแกรมนี้นั้นคือโปรแกรมหา อุณหภูมิเกิดการกลั่นตัว (dew point) และ อุณหภูมิเกิดฟอง (bubble point) ซึ่งมีความสำคัญมากเนื่องจากหอฟื้นฟูสภาพนั้นมีความเกี่ยวเนื่องกับสมดุลพลังงาน ในสมดุลพลังงานนั้นต้องใช้ค่าพลังงานเนื่องจากปฏิกิริยาซึ่งอยู่ในรูปของ ดูดความร้อน

ส่วนที่ 3 รายการคำนวณสำหรับค่า ฟิวกาซิตี้ รวมถึงการคำนวณ อุณหภูมิจุดเกิดไอ และอุณหภูมิจุดกลั่นตัวตามลำดับ

4.1 การคำนวณในระบบจำลองกระบวนการดูดซึม

ในการคำนวณระบบนี้จะใช้การคำนวณแบบขั้นตอนสมดุลเป็นสำคัญโดยอาศัยค่าคงที่สมดุลในการเกิดปฏิกิริยาเป็นกุญแจสำคัญในการคำนวณร่วมกับสมดุลมวลสารและสมดุลพลังงาน ในที่นี้พอจะอธิบายได้ตามขั้นตอนดังนี้

1. สมมุติจำนวนโมลที่ถูกดูดซึม ของสายแก๊สเข้า Y1 (Kgmol/Hr)
2. เริ่มทำสมดุลมวลสาร หาค่าอัตราส่วนของเหลวต่อแก๊ส L/V = (Lean feed + Y1) / Rich gas
3. คำนวณหาค่าความร้อนในสายเข้า ทั้งของเหลวและแก๊ส (HL,HV)รายละเอียดในการใช้หาค่า Enthalpy มีดังนี้

3.1 ค่าความจุความร้อน Heat capacity สามารถหาได้จากรูปสมการทั่วไปดังนี้

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 \text{.....} Liq \text{.....} (4.1.1)$$

$$C_P = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \text{.....} Gas \text{.....} (4.1.2)$$

โดยข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณครั้งนี้ได้มาจากหนังสือ Chemical Property Handbook โดย Carl. Yaws

3.2 ค่า Enthalpy สามารถหาได้จากข้อที่ 1 โดยสามารถคำนวณได้ดังนี้

$$\Delta H = \int C_P dT = \int (A + BT + CT^2 + DT^3) dT \text{.....} Liq \text{.....} (4.1.3)$$

$$\Delta H = (AT + (B/2)T^2 + (C/3)T^3 + (D/4)T^4)_{T_1}^{T_2} \text{.....} Liq \text{.....} (4.1.4)$$

$$\Delta H = \int C_p dT = \int (A + BT - CT^2 + DT^3 + ET^4) dT \text{.....} Gas \text{...} (4.1.5)$$

$$\Delta H = (AT + (B/2)T^2 + (C/3)T^3 + (D/4)T^4 + (E/5)T^5)_{T_1}^{T_2} \text{.....} Gas \text{..} (4.1.6)$$

4. สมมุติอุณหภูมิบริเวณ ยอดหอ ก้นหอ และเฉลี่ยทั้งหอจาก อุณหภูมิสายเข้าทั้งของเหลวและแก๊ส TT,TB,TA (Kelvin)

5. คำนวณหาค่าคงที่สมดุลของแต่ละสารจากการทดลองอยู่ในรูปสมการดังนี้ (K)

ในการคำนวณเราจะแบ่งออกเป็นสองส่วนคือส่วนที่สารทำปฏิกิริยาและส่วนที่สารไม่ทำปฏิกิริยา

5.1 สมการลีเคสเลอร์ (*Lee-Kesler equation)* เป็นสมการที่พัฒนาใช้ควบคู่ไปกับ Acentric factor ค่าต่างๆของสมการหาได้ง่ายพอๆกับสมการแอนโทอีน (Antoine equation) แต่ให้ค่าผิดพลาด (Error) น้อยกว่า

$$\ln P_{V\,\mathrm{Pr}} = f^0(T_r) + \omega f^{(1)}(T_r) \text{.....} (4.1.7)$$

$$f^{(0)} = 5.92714 - \frac{6.09648}{T_r} - 1.28862 \ln T_r + 0.169347 T_r^6 \text{.....} (4.1.8)$$

$$f^{(1)} = 15.2518 - \frac{15.6875}{T_r} - 13.4721 \ln T_r + 0.43577 T_r^6 \text{.....} (4.1.9)$$

ค่าผิดพลาด(Error) อยู่ที่ประมาณ 0-1%

5.2 สมการค่าสมดุลระหว่างคาร์บอนไดออกไซด์ และ สารละลายโมโนเอทาโนลามีนของเดมัคช์ (Deshmukh) ใช้ร่วมกับสมการสมดุลของสารอื่นๆ รายละเอียดในการคำนวณของสมการสมดุลของเดสมัคช์อยู่ในภาคผนวก

6. หา แฟคเตอร์ของการดูดซึมโดยใช้สมการ แฟคเตอร์การดูดซึม = อัตราส่วนของเหลวต่อแก๊ส / ค่าคงที่สมดุล (A = (L/V)/K)

7. สมการเฉพาะที่พัฒนาขึ้นมาจากสมการ โอเวนแมดดอกซ์(Owen and Maddox) สำหรับประมาณประสิทธิภาพของการดูดซึม สามารถคำนวณหาสมการแฟคเตอร์ของการดูดซึมได้ดังนี้

$$\pi_A = A_T A_A^{n-2} A_B \quad \text{.....(4.1.10)}$$

$$\Sigma_A = A_T A_A^{n-2} A_B + A_A^{n-2} A_B + \ldots + A_A A_B + A_B \quad \text{.....(4.1.11)}$$

8 สมการของโอเวนแมดดอกซ์(Owen and Maddox) นำมาคำนวณร่วมกับสมดุลมวลสารเพื่อคำนวณหาส่วนประกอบของ แก๊สขาออกตามสมการดังนี้

$$V_1 = V_{n+1}\left(\frac{1}{\Sigma_A + 1}\right) + L_1\left(1 - \frac{\pi_A}{\Sigma_A + 1}\right) \quad \text{.....} \quad \text{..(4 .1 .12)}$$

V_1 = จำนวนโมลของสายแก๊สขาออก

$V_{(n+1)}$ = จำนวนโมลของสายแก๊สสายขาเข้า

L_1 = จำนวนโมลของสายของเหลวขาเข้า

9 คำนวณสัดส่วนของเหลวในสายแก๊สขาออก โดยใช้ค่าคงที่สมดุลตามสมการ

$$X = \frac{V_{1i}}{(\sum V1) * K_i} \quad \text{.....(4.1.13)}$$

X = สัดส่วนโมลของสายแก๊สใน Second tray

K = ค่าคงที่สมดุลของแต่ละสารใดๆที่ Top tray

10 หาสัดส่วนโมลของ โมโนเอทาโนลามีนจากสมดุลเคมีระหว่างสายแก๊สขาออกกับ สายของเหลวออกที่ Stage 1

$$X_{L_{n+1}} = 1 - \sum X \quad \text{.....(4.1.14)}$$

$X(L_n + 1)$ = สัดส่วนโมลของสายของเหลวใน Second tray

11 คำนวณหาอัตราการไหลของเหลวที่ออกจาก Stage1 และคำนวณหาสัดส่วนโมลของแก๊สสายเข้าที่Stage 1

$$L_1 + V_{n+1} = V_1 + L_{n+1} \quad \text{.....(4.1.15)}$$

L_1 = สายของเหลวเข้าหอดูดซึม

$V_{(n+1)}$ = สายของแก๊สเข้าหอดูดซึม

$L_{(n+1)}$ = สายของเหลวออกหอดูดซึม

$V_{(1)}$ = สายของแก๊สออกจากหอดูดซึม

12 การตรวจสอบค่าความถูกต้องใช้ (1/1000) มีรายละเอียดดังนี้

- จำนวนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์คำนวณหลักสิบ ตรวจสอบ 0.001
- ค่าอุณหภูมิคำนวณหลักร้อย ตรวจสอบ 0.01
- ค่าพลังงานคำนวณ หลักหมื่นล้าน ตรวจสอบ 1000 หรือ (1000/10000000000)

13 คำนวณหาอุณหภูมิของ Stage 2 ได้จากสมการดังต่อไปนี้

$$T_2 = \frac{T_B - T_T}{n} + \left[T_A - \left(\frac{T_T + T_B}{2} \right) \right] \text{.....} \quad \text{....(4 .1 .16)}$$

T_B = อุณหภูมิที่ก้นหอ

T_T = อุณหภูมิที่ยอดหอ

T_A = อุณหภูมิเฉลี่ยทั้งหอ

14 คำนวณหาอุณหภูมิใหม่ของ Top tray และเปรียบเทียบกับอุณหูมิเก่า

$$T_{DG} = \frac{\Delta H_{A,T} - [C_{P2}(T_{DG} - T_2)]}{C_{PLO}} \text{.....(4.1.17)}$$

T_{DG} = อุณหภูมิของ Dry gas ที่ออกจากหอดูดซึม

T_{LO} = อุณหภูมิของ Lean oil ที่เข้าหอดูดซึม

H_{AT} = ค่าความร้อนของการดูดซึมของ Top tray

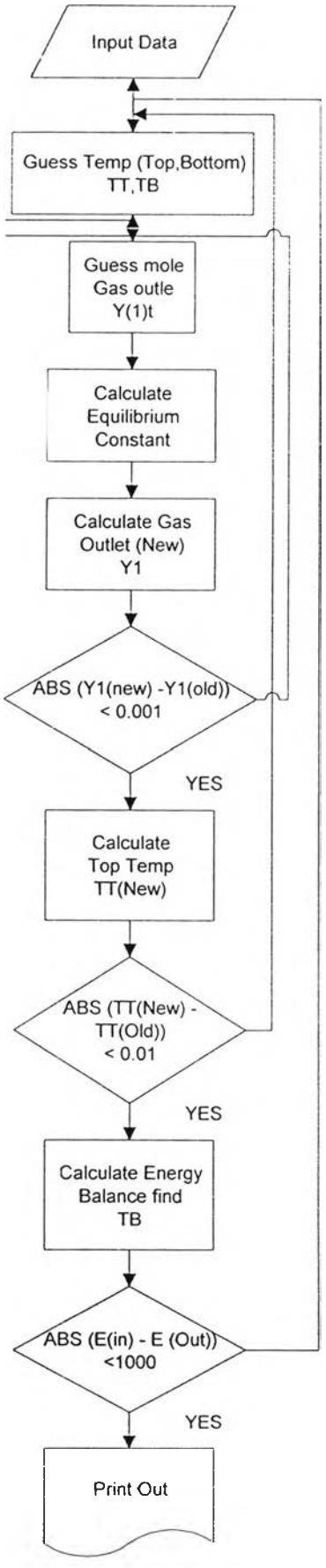
Cp_2 = ค่าความจุความร้อนสายแก๊สที่ออกจาก Second tray

Cp_{lo} = ค่าความจุความร้อนสายของเหลวที่เข้า หอดูดซึม

T_2 = อุณหภูมิที่ Second tray

15 เปรียบเทียบอุณหภูมิใหม่ของ Top tray กับ อุณหภูมิเก่าถ้าแตกต่างกันเกิน 0.5 Kelvin ให้สมมุติค่าอุณหภูมิ Top tray ใหม่แล้วทำการคำนวณย้อนกลับไปขั้นตอนที่ 5 จนกระทั่งได้อุณหภูมิใหม่ที่ต่างจากอุณหภูมิเก่าไม่เกิน 0.01 เคลวิน

16 ขั้นตอนสุดท้ายคือคำนวณหาอุณหภูมิที่สายของเหลวขาออกสมมุติอุณหภูมิสายออกแล้วทำสมดุลพลังงานรอบหอทั้งหมดหาจุดที่ผลแตกต่างระหว่างพลังงานเข้ากับพลังงานออกมีน้อยที่สุดตรงจุดนั้นเราจะได้ อุณหภูมิ ณ. สายของเหลวออก


Input Data
Guess Temp (Top,Bottom)
TT,TB
Guess mole
Gas outle
Y(1)t
Calculate
Equilibrium
Constant
Calculate Gas
Outlet (New)
Y1
ABS (Y1(new) -Y1(old))
< 0.001
YES
Calculate
Top Temp
TT(New)
ABS (TT(New) -
TT(Old))
< 0.01
YES
Calculate Energy
Balance find
TB
ABS (E(in) - E (Out))
<1000
YES
Print Out

4.2 การคำนวณในหอฟื้นฟูสภาพ

ในการคำนวณหอฟื้นฟูสภาพนั้นใช้หลักการเดียวกันคือใช้หลักการขั้นตอนสมดุล ค่าคงที่สมดุลปฏิกิริยาเคมีที่ถูกต้อง สมดุลมวลสารและสมดุลพลังงาน

1. ป้อนข้อมูลต่างๆ เช่นอุณหภูมิ ความดัน รวมทั้งข้อมูลสายป้อนเข้าซึ่งเป็นสายเดียวกันกับสายของเหลวออกในหอดูดซึม ใช้สมการสมดุลพื้นฐานสมการเดียวกันกับหอดูดซึม ดังนั้นในการคำนวณค่าคาร์บอนไดออกไซด์ก็จะใช้สมการของ เดชมัค(Deshmuck) เช่นเดียวกัน

2. คำนวณหาสัดส่วนไอและของเหลวในสายป้อนเข้าของหอฟื้นฟูสภาพดังสมการนี้

$$V_F = \sum v_i = \sum \frac{K_i f_i}{(L_F / V_F) + K_i} \quad \text{.....(4.2.1)}$$

V_F = จำนวนโมลแก๊สทั้งหมดของสายเข้า

V_i = จำนวนโมลแก๊สในแต่ละสารในสายเข้า

f_i = จำนวนโมลของของแต่ละสารในสายเข้า

L_F = จำนวนโมลของเหลวในสายเข้า

Ki = ค่าคงที่สมดุลของแต่ละสาร

3. เลือกสารที่เราต้องการแยกออก โดยที่เราต้องกำหนดลงไปว่าสารดังกล่าวนั้นสามารถแยกออกมาได้กี่ % ตามสมการการคำนวณดังนี้

$$Es = \frac{S^{n+1} - S}{S^{n+1} - 1} \quad \text{.....(4.2.2)}$$

จากสมการข้างต้นเราสามารถหาจำนวนโมลของสารที่ถูกดูดซึมได้ดังนี้

$$Vs = L_F * Es \quad \text{.....(4.2.3)}$$

4. ดังนั้นจำนวนโมลของแก๊สทั้งหมดที่ผ่านด้านบนของหอเราจะนำค่า โมลที่เป็นแก๊สของสายเข้ารวมกับโมลของแก๊สที่ถูกแยกออกมาตามสมการ

$$Netoverhead = V_S + V_F$$
$$Leanoil = Feed - Netoverhead$$

5. คำนวณหาปริมาณของไอน้ำที่ต้องใช้ ซึ่งเราจะต้องใช้ข้อมูลด้านบนหอดังนี้

$$S = \frac{V_{Top} K}{L_{Top}} \quad \text{..... ....(4.2.4)}$$
$$V_{Top} = V_S + V_{Stream} \quad \text{..... ....(4.2.5)}$$
$$L_{Top} = L_F \quad \text{..... ....(4.2.6)}$$

6. ใช้โปรแกรมย่อยคำนวณหาค่าอุณหภูมิจุดเกิดฟอง (Bubble point) และ อุณหภูมิจุดกลั่นตัว (Dew point) ซึ่งจะมีการอธิบายต่อไป

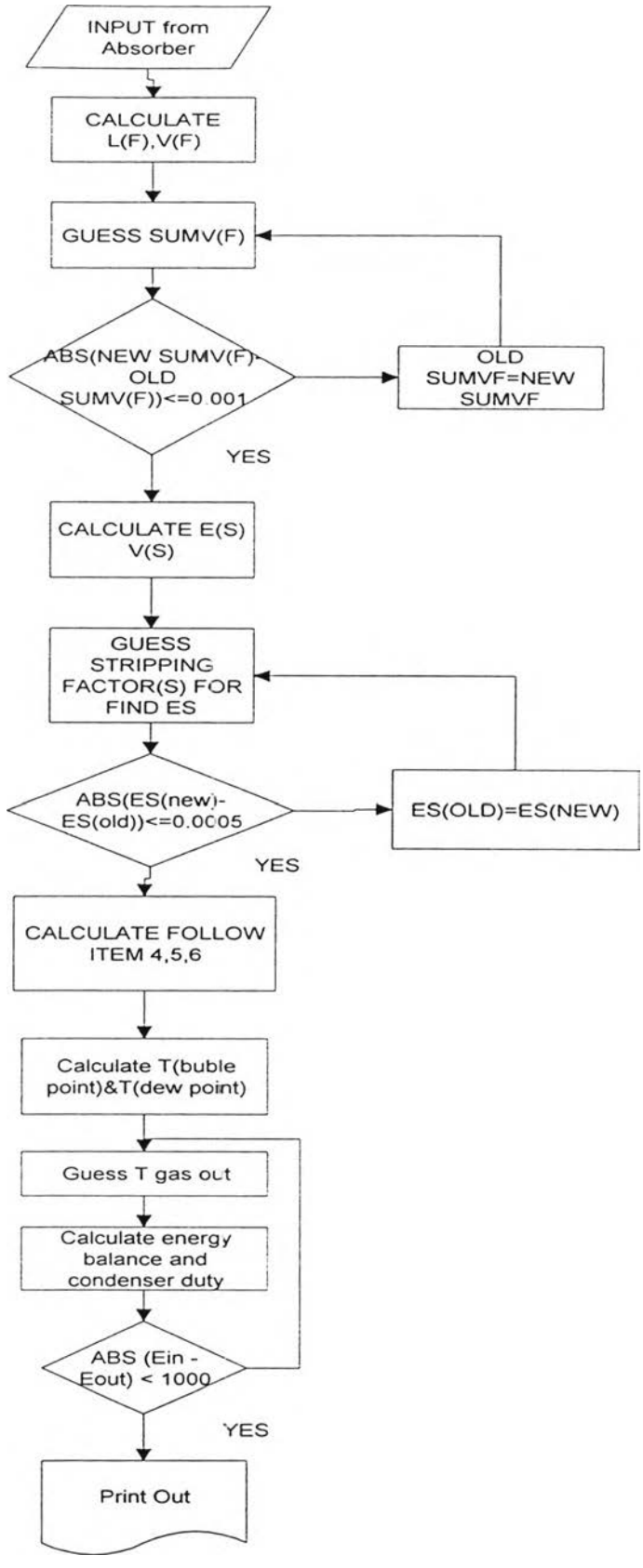
7. สมมุติค่าอุณหภูมิของสายของเหลวขาออกในหอฟื้นฟูสภาพมีอุณหภูมิเท่ากับอุณหภูมิที่หม้อต้มซ้ำ(Reboiler)เพื่อใช้ในการคำนวณสมดุลพลังงานโดยที่ค่าอุณหภูมิของหม้อต้มซ้ำใช้ค่าอุณหภูมิจุดเกิดฟอง(Bubble point) สำหรับส่วนประกอบต่างๆบริเวณด้านล่างของหอ

8. หาค่าพลังงานหม้อควบแน่น(Condenser duty) ได้จากการทำสมดุลพลังงาน โดยให้ หม้อควบแน่น และ อุณหภูมิยอดหอดำเนินการภายใต้อุณหภูมิจุดเกิดฟอง(Bubble point) ส่วนด้านล่างของหอให้ดำเนินการภายในสภาวะอุณหภูมิจุดกลั่นตัวตามลำดับ

9 การตรวจสอบค่าความถูกต้องใช้ (1/1000) มีรายละเอียดดังนี้

- จำนวนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์คำนวณหลักสิบ ตรวจสอบ 0.001
- ค่าอุณหภูมิคำนวณหลักร้อย ตรวจสอบ 0.01
- ค่าพลังงานคำนวณ หลักหมื่นล้าน ตรวจสอบ 1000 หรือ (1000/10000000000)

10. สุดท้ายคำนวณหาอุณหภูมิสายเก๊สขาออกโดยสมมุติอุณหภูมิสายออกแล้วทำสมดุลพลังงานรอบหอฟื้นฟูสภาพตรวจสอบค่าความแตกต่างของพลังงานขาเข้าและพลังงานขาออกหาค่าที่ต่ำที่สุดที่จุดนั้นจะได้อุณหภูมิแก๊สขาออก


INPUT from Absorber
CALCULATE L(F),V(F)
GUESS SUMV(F)
ABS(NEW SUMV(F)-OLD SUMV(F))<=0.001
OLD SUMVF=NEW SUMVF
YES
CALCULATE E(S) V(S)
GUESS STRIPPING FACTOR(S) FOR FIND ES
ABS(ES(new)-ES(old))<=0.0005
ES(OLD)=ES(NEW)
YES
CALCULATE FOLLOW ITEM 4,5,6
Calculate T(buble point)&T(dew point)
Guess T gas out
Calculate energy balance and condenser duty
ABS (Ein - Eout) < 1000
YES
Print Out

กระบวนการคำนวณอุณหภูมิ ณ.จุดเกิดฟอง และ จุดกลั่นตัว

โปรแกรมย่อยในการคำนวณดังกล่าวนี้จะเขียนเป็นโปรแกรมย่อยได้อีกดังนี้

1. สร้างโปรแกรมย่อยสำหรับคำนวณค่าสัมประสิทธิ์ฟิวกาซิตี้
2. สร้างโปรแกรมย่อยสำหรับคำนวณอุณหภูมิ ณ. จุดเกิดฟอง (Bubble point)
3. สร้างโปรแกรมย่อยสำหรับคำนวณอุณหภูมิ ณ. จุดกลั่นตัว (Dew point)

ในที่นี้พอจะอธิบายถึงวิธีการคำนวณและขั้นตอนได้ดังนี้

4.3 คำนวณค่าสัมประสิทธิ์ฟิวกาซิตี

ใช้สมการช่วยในการคำนวณหาค่าฟูกาซิตี้จากสมการของเดชมัคซ์(Deshmuck)ร่วมกับระบบสมการสถานะเปง-โรบินสันและกฎการผสมวันฟลูอิด จะสามารถคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์ฟิวกาซิตีในสถานะไอ และค่าสัมประสิทธิ์ฟิวกาซิตีของ คาร์บอนไดออกไซด์กรณีที่เกิดปฏิกิริยาเคมีในสถานะของเหลวได้ดังสมการด้านล่าง

$$\ln f_i^V = -\ln(Z_V - B) + (Z_V - 1)B_i - \frac{A}{2^{1.5}B}(A_i - B_i)\ln\left[\frac{Z_V + (2^{0.5}+1)B}{Z_V - (2^{0.5}-1)B}\right] \quad \text{.....(4.3.1)}$$

$$Z_V^3 - (1-B)Z_V^2 + (A - 2B - 3B^2)Z_V - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad \text{.....(4.3.2)}$$

$$\ln f_i^L = -\ln(Z_L - B) + (Z_L - 1)B_i - \frac{A}{2^{1.5}B}(A_i - B_i)\ln\left[\frac{Z_L + (2^{0.5}+1)B}{Z_L - (2^{0.5}-1)B}\right] \quad \text{....(4.3.3)}$$

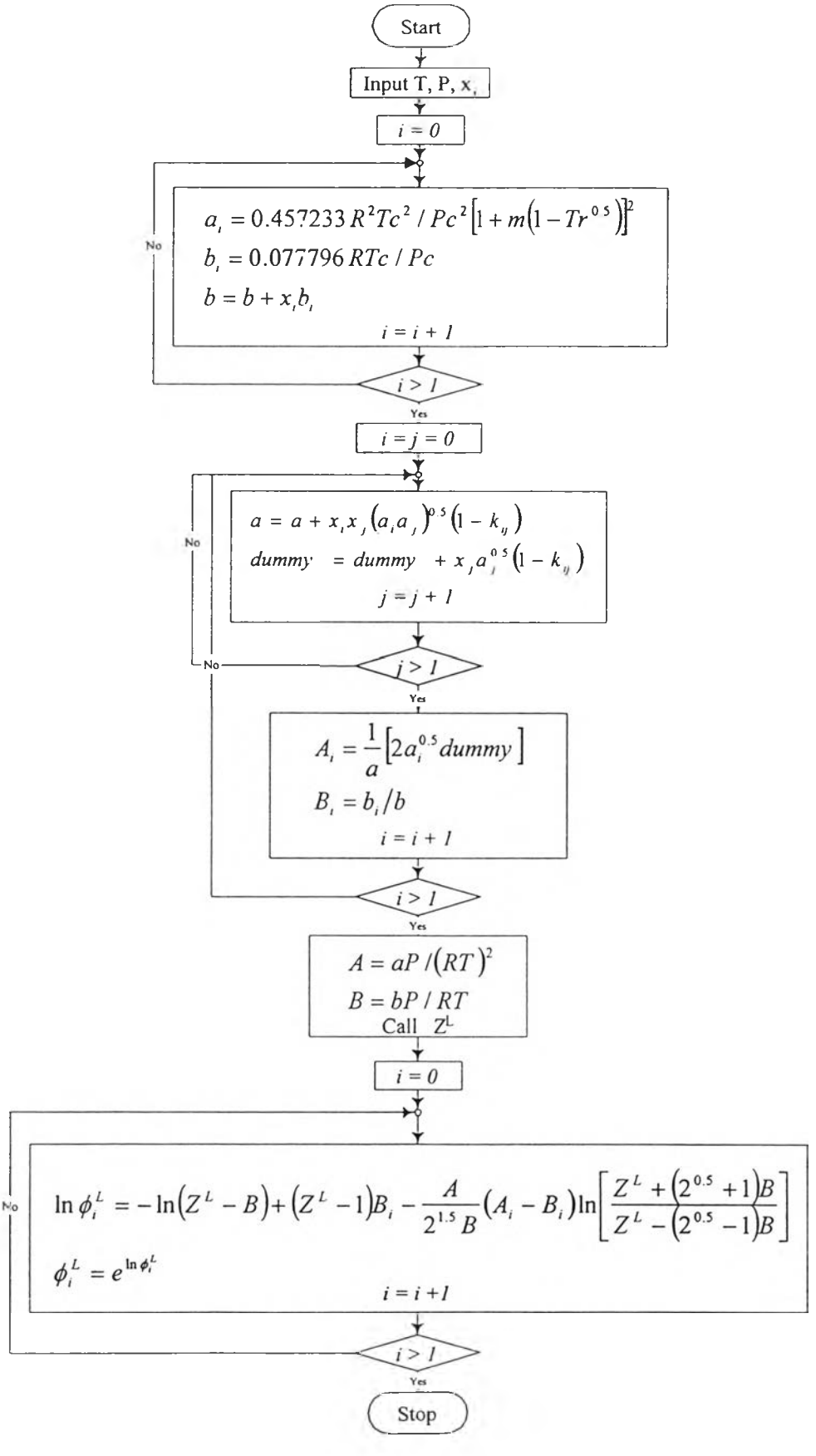
$$Z_L^3 - (1-B)Z_L^2 + (A - 2B - 3B^2)Z_L - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad \text{.....(4.3.4)}$$

โดยที่ $A = \dfrac{aP}{(RT)^2}$, $B = \dfrac{bP}{RT}$

$$A_i = \frac{1}{a}\left[2a_i^{0.5}\sum_j^N x_j a_j^{0.5}(1-k_{ij})\right] \quad , \qquad B_i = \frac{b_i}{b}$$

และค่า a และ b มีค่าเป็น

$$a = \sum_i^N \sum_j^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5}(1-k_{ij}) \quad , \qquad b = \sum_i^N x_i b_i$$


Start
Input T, P, x,
i = 0
$a_i = 0.457233\,R^2Tc^2 / Pc^2\left[1 + m\left(1 - Tr^{0.5}\right)\right]^2$
$b_i = 0.077796\,RTc / Pc$
$b = b + x_i b_i$
i = i + 1
i > 1
No
Yes
i = j = 0
$a = a + x_i x_j \left(a_i a_j\right)^{0.5}\left(1 - k_{ij}\right)$
$dummy = dummy + x_j a_j^{0.5}\left(1 - k_{ij}\right)$
j = j + 1
j > 1
No
Yes
$A_i = \frac{1}{a}\left[2a_i^{0.5}\,dummy\right]$
$B_i = b_i / b$
i = i + 1
i > 1
Yes
$A = aP/(RT)^2$
$B = bP/RT$
Call Z^L
i = 0
$\ln\phi_i^L = -\ln\left(Z^L - B\right) + \left(Z^L - 1\right)B_i - \frac{A}{2^{1.5}B}\left(A_i - B_i\right)\ln\left[\frac{Z^L + \left(2^{0.5}+1\right)B}{Z^L - \left(2^{0.5}-1\right)B}\right]$
$\phi_i^L = e^{\ln\phi_i^L}$
i = i + 1
i > 1
No
Yes
Stop

4.4 การคำนวณอุณหภูมิที่จุดเกิดฟอง

ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงการการคำนวณหาค่าอุณหภูมิที่จุดเกิดฟอง ในที่นี้จะขอกล่าวถึงการนำไปใช้ในการเขียนโปรแกรม การสมมุติค่าเริ่มต้น พร้อมทั้งขั้นตอนในการคำนวณสำหรับการคำนวณหาค่าอุณหภูมิที่จุดเกิดฟองจะมีขั้นตอนการคำนวณและการเขียนโปรแกรมคำนวณอุณหภูมิที่จุดบับเบิลจำเป็นต้องทราบค่าสัดส่วนโมลในสถานะของเหลว และค่าอุณหภูมิ เสียก่อนว่ามีค่าเท่าใด จึงจะสามารถนำค่าดังกล่าวมาคำนวณหาอุณหภูมิที่จุดเกิดฟอง และสัดส่วนโมลในสถานะไอได้ ขั้นตอนที่แตกต่างจากการคำนวณค่าความดันก็คือ ต้องสมมุติค่าอุณหภูมิที่จุดเกิดฟอง และค่า K เริ่มต้นขึ้นมาก่อนจากนั้นจึงคำนวณหาค่าของ y_i ได้จากสมการ

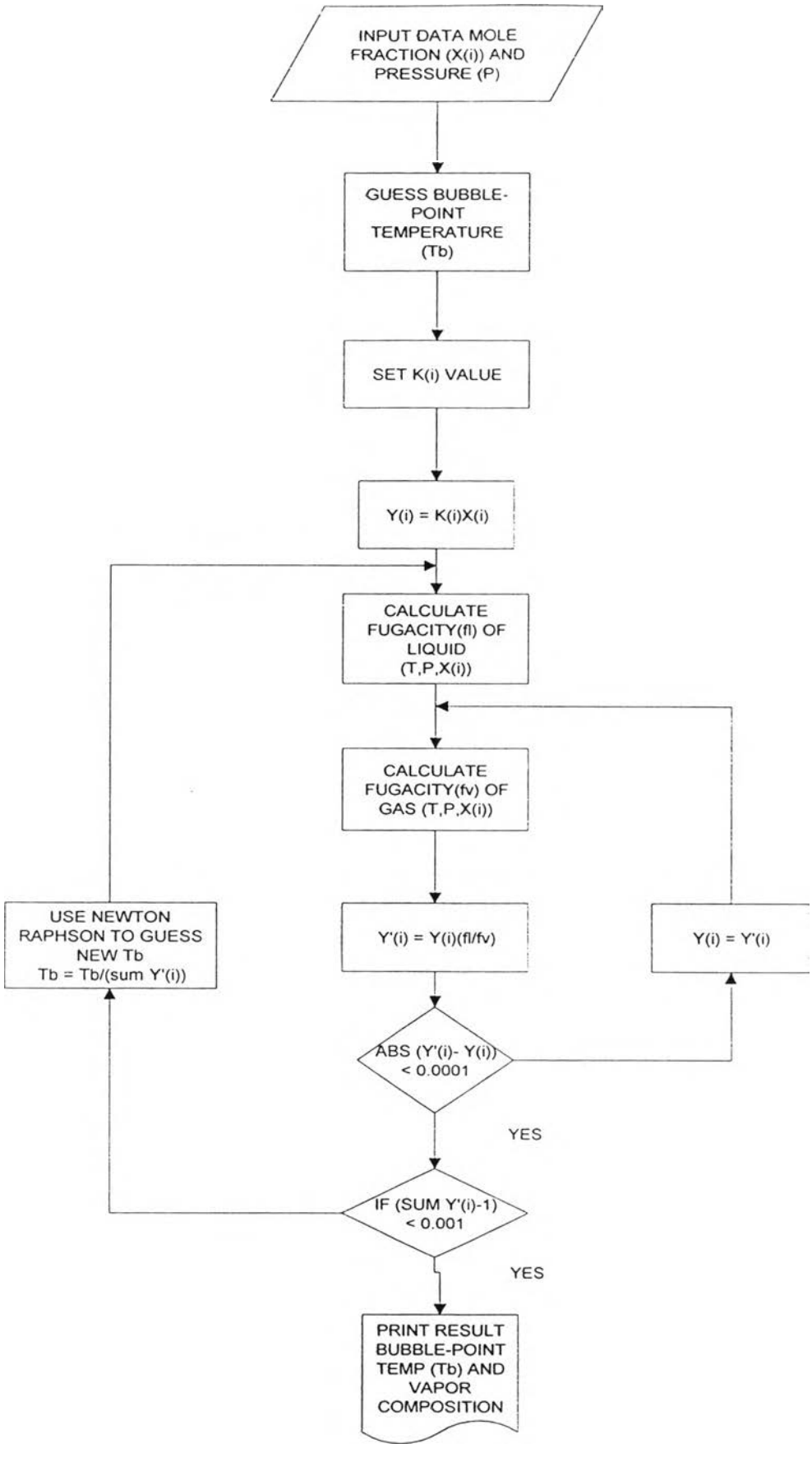
$$y_i = K_i x_N \quad \text{.....(4.4.1)}$$

จากนั้นให้คำนวณหาค่า ฟิวกาซิตี้ของเหลวและแก๊สตามลำดับหลักการในการคำนวณได้อธิบายไว้ข้างต้นแล้ว นำค่าฟิวกาซิตี้ที่คำนวณได้มาใช้ในการคำนวณหา สัดส่วนโมลใหม่ตามสมการ

$$Y'_i = Y_i \frac{f_i^L}{f_i^V} \quad (i = 1, 2, 3 \ldots N) \quad \text{.....(4.4.2)}$$

หลังจากที่ได้ค่าสัดส่วนโมลใหม่แล้วต้องตรวจสอบว่าถูกต้องหรือไม่โดยการเปรียบเทียบกับสัดส่วนโมลเก่าถ้าค่าเปรียบเทียบมีมากกว่าค่าที่ยอมรับได้ก็ให้นำค่าสัดส่วนโมลใหม่มาคำนวณใหม่ตั้งแต่ขั้นตอนหาค่าฟิวกาซิตี้ในวัฏภาคแก๊ส แต่ถ้าค่าเปรียบเทียบยอมรับได้ตรวจสอบต่อไปว่าผลรวมของสัดส่วนโมลดังกล่าวเท่ากับ 1 หรือไม่ ถ้าผลรวมดังกล่าวไม่ได้ให้หาค่าอุณหภูมิจุดเกิดฟองใหม่โดยใช้วิธี นิวตันราฟสัน (Newton-raphson) นำไปแทนค่าอุณหภูมิเก่าแล้วเริ่มต้นคำนวณใหม่ตั้งแต่การคำนวณหาค่าฟิวกาซิตี้วัฏภาคของเหลว แต่ค่าที่ได้ใกล้เคียงมากจนยอมรับได้ค่าอุณหภูมิสุดท้ายคืออุณหภูมิ ณ.จุดเกิดฟอง

I 19812620


INPUT DATA MOLE FRACTION (X(i)) AND PRESSURE (P)
GUESS BUBBLE-POINT TEMPERATURE (Tb)
SET K(i) VALUE
Y(i) = K(i)X(i)
CALCULATE FUGACITY(fl) OF LIQUID (T,P,X(i))
CALCULATE FUGACITY(fv) OF GAS (T,P,X(i))
Y'(i) = Y(i)(fl/fv)
ABS (Y'(i)- Y(i)) < 0.0001
Y(i) = Y'(i)
YES
IF (SUM Y'(i)-1) < 0.001
USE NEWTON RAPHSON TO GUESS NEW Tb
Tb = Tb/(sum Y'(i))
YES
PRINT RESULT BUBBLE-POINT TEMP (Tb) AND VAPOR COMPOSITION

4.5 การคำนวณอุณหภูมิที่จุดกลั่นตัว

เมื่อต้องการทราบค่าอุณหภูมิและสัดส่วนโมลในสถานะของเหลวที่จุดกลั่นตัว จำเป็นที่จะต้องกำหนดค่าความดัน P และสัดส่วนโมลในสถานะไอ y_i ที่ต้องการทราบก่อน จึงจะสามารถคำนวณหาค่าอุณหภูมิและสัดส่วนโมลในสถานะของเหลวที่จุดกลั่นตัวที่ต้องการทราบได้ ขั้นตอนการคำนวณก็คล้ายๆ กับการคำนวณค่าความดันและสัดส่วนโมลในสถานะของเหลวที่จุดกลั่นตัว ซึ่งการคำนวณจะเริ่มด้วยการสมมุติค่าอุณหภูมิ Td ค่า Ki เริ่มต้นก่อน คำนวณค่า Xi จากสมการนี้

$$X_i = Y_i / K_i \quad \text{.....(4.5.1)}$$

จากนั้นให้เริ่มต้นคำนวณหาค่าฟิวกาซิตี้ในวัฏภาคของแก๊และของเหลวตามลำดับ จากนั้นนำค่าฟิวกาซิตีที่ได้มาช่วยคำนวณหาค่า Xi ใหม่ตามสมการ

$$X'_i = X_i \frac{f_i^V}{f_i^L} (i = 1,2,3...N) \quad \text{.....(4.5.2)}$$

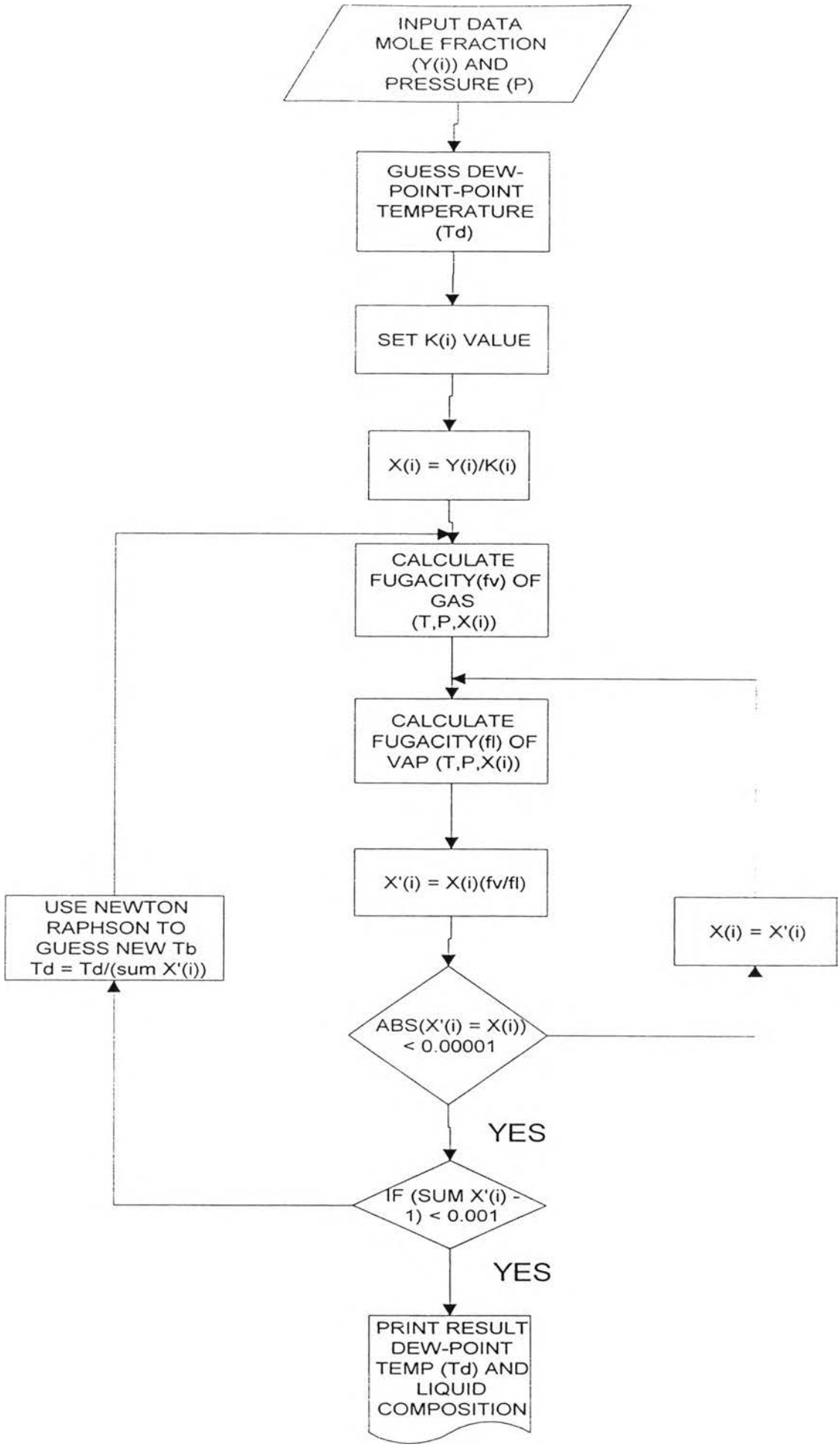
นำค่า $X'(I)$ ที่ได้ใหม่มาเปรียบเทียบกับ Xi ที่มีอยู่เดิมถ้าไม่แตกต่างกันมากก็ให้นำค่า $X'I$ แทนค่า Xi แล้วเนำค่า Xi ใหม่ไปริ่มต้นคำนวณใหม่ตั้งแต่ช่วงคำนวณค่าฟิวกาซิตีวัฏภาคของเหลว แต่ถ้าค่าไม่แตกต่างกันมากนัก ตรวจสอบขั้นต่อไปคือ

$$\sum X_i = 1 \quad \text{.....(4.5.3)}$$

ในขั้นตอนนี้ถ้าค่าที่ได้ไม่ใกล้เคียง 1 ก็ให้กำหนดค่าอุณหภูมิจุดกลั่นตัวใหม่ ซึ่งใช้วิธีของ นิวตันราฟสัน เข้ามาช่วยประกอบกับสมการ

$$T_d = T_d / \sum X'_i \quad \text{.....(4.5.4)}$$

นำค่าอุณหภูมิใหม่ไปเริ่มคำนวณตั้งแต่ ช่วงคำนวณหาค่า ฟิวกาซิตี ในวัฏภาคแก๊ส เมื่อการคำนวณผ่านขั้นตอนต่างๆหมดแล้วจะได้ค่าอุณหภูมิ ณ.จุดกลั่นตัว


INPUT DATA MOLE FRACTION (Y(i)) AND PRESSURE (P)
GUESS DEW-POINT-POINT TEMPERATURE (Td)
SET K(i) VALUE
X(i) = Y(i)/K(i)
CALCULATE FUGACITY(fv) OF GAS (T,P,X(i))
CALCULATE FUGACITY(fl) OF VAP (T,P,X(i))
X'(i) = X(i)(fv/fl)
ABS(X'(i) = X(i)) < 0.00001
X(i) = X'(i)
YES
IF (SUM X'(i) - 1) < 0.001
USE NEWTON RAPHSON TO GUESS NEW Tb Td = Td/(sum X'(i))
YES
PRINT RESULT DEW-POINT TEMP (Td) AND LIQUID COMPOSITION

จากกระบวนการข้างต้น(Flow diagrarm) การคำนวณทั้งหอดูดซึม และ หอฟื้นฟูสภาพนั้น สามารถคำนวณได้ตามรายละเอียดข้างต้นในระบบการควบคุมการคำนวณสำหรับหอดูดซึมนั้นเราจะไม่กำหนดค่าใดๆโดยจะปล่อยให้การคำนวณดำเนินไปตาม กระบวนการ ในส่วนของหอฟื้นฟูสภาพนั้นเราจะใช้ค่าจุดกลั่นตัวเป็นค่าตรวจสอบในการกำหนดอุณหภูมิของหม้อต้มซ้ำ เพื่อใช้ในอุณหภูมิของสายของเหลวขาออกต่อไป ในส่วนของหอฟื้นฟูสภาพนั้นหลังจากคำนวณแล้วจะต้องมีการตรวจสอบค่าความเข้มข้นของ คาร์บอนไดออกไซด์ ในสายของเหลวขาออกให้ไม่เกินสายของเหลวขาเข้าในหอดูดซึมต่อไป

4.6 การหาสภาวะการดำเนินการที่เหมาะสม

4.6.1 **ข้อจำกัดสมมาตร** (The equality constrain) ในกระบวนการนี้ก็คือสมการที่ใช้โปรแกรมต่างคือ

สมการสมดุลมวลสารรวม

หอดูดซึม : $$L_1 + V_{n+1} = V_1 + L_{n+1} \quad \text{.....(4.6.1.1)}$$

หอฟื้นฟูสภาพ : $$L_{n+1,L} + L_{n+1,V} = V_2 + L_2 \quad \text{.....(4.6.1.2)}$$

สมการสมดุลมวลส่วนประกอบ

หอดูดซึม : $$x_1 L_1 + y_{n+1} V_{n+1} = y_1 V_1 + x_{n+1} L_{n+1} \quad \text{.....(4.6.1.3)}$$

หอฟื้นฟูสภาพ : $$xL_{n+1,L} + yL_{n+1,V} = y_2 V_2 + x_2 L_2 \quad \text{.....(4.6.1.4)}$$

สมการสมดุลพลังงาน

หอดูดซึม : $$H_1 L_1 + h_{n+1} V_{n+1} + Q_{reaction} y_{n+1} = h_{n+1} V_1 + H_{n+1} L_{n+1} \quad \text{.....(4.6.1.5)}$$

หอฟื้นฟูสภาพ : $$L_{n+1,L} H_{n+1} + L_{n+1,V} h_{n+1} + Q_{reboiler} = h_2 V_2 + H_2 L_2 + Q_{reaction} \quad \text{.....(4.6.1.6)}$$

สมการค่าคงที่สมดุล

$$y = Kx \quad \text{.....(4.6.1.7)}$$

สมการความสัมพันธ์ค่าพลังงาน

$$h = h(p,T,y) \quad \text{.....(4.6.1.8)}$$
$$H = H(p,T,x) \quad \text{.....(4.6.1.9)}$$
$$h = m_y c_p(\Delta T) \quad \text{.....(4.6.1.10)}$$
$$H = m_x c_p(\Delta T) \quad \text{.....(4.6.1.11)}$$

สมการความสัมพันธ์ของสัดส่วนโมล

$$\sum_{i=1}^{m} x = 1 \text{.....(4.6.1.12)}$$

$$\sum_{i=1}^{m} y = 1 \text{.....(4.6.1.13)}$$

ข้อจำกัดที่สำคัญสำหรับในการคำนวณในโปรแกรมคือค่าความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์สายของเหลวออกในหอฟื้นฟูสภาพต้องเท่ากับค่าความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์สายของเหลวสายเข้าในหอดูดซึม

$$x_{2,CO_2} = x_{1,CO_2} \text{.....(4.6.1.14)}$$

4.6.2 **ข้อจำกัดไม่สมมาตร** (The inequality constraints) สามารถกำหนดได้ดังนี้

ค่าความเข้มข้นของคาร์บอนไดออกไซด์ในสายแก๊สออก ต้องไม่เกิน 0.01 Mol%

$$x_{co_2,1} \leq 0.01(Mol\%) \text{.....(4.6.2.15)}$$

ค่าอัตราการไหลต่ำสุดและสูงสุดในสายของเหลวและแก๊สสำหรับหอดูดซึม

$$Minimum < L_{input} < Maximum \text{.....(4.6.2.16)}$$

$$Minimum < V_{input} < Maximum \text{.....(4.6.2.17)}$$

ค่าพลังงานของหม้อต้มซ้ำมีค่ามากกว่าศูนย์และค่าอื่นๆดังนี้

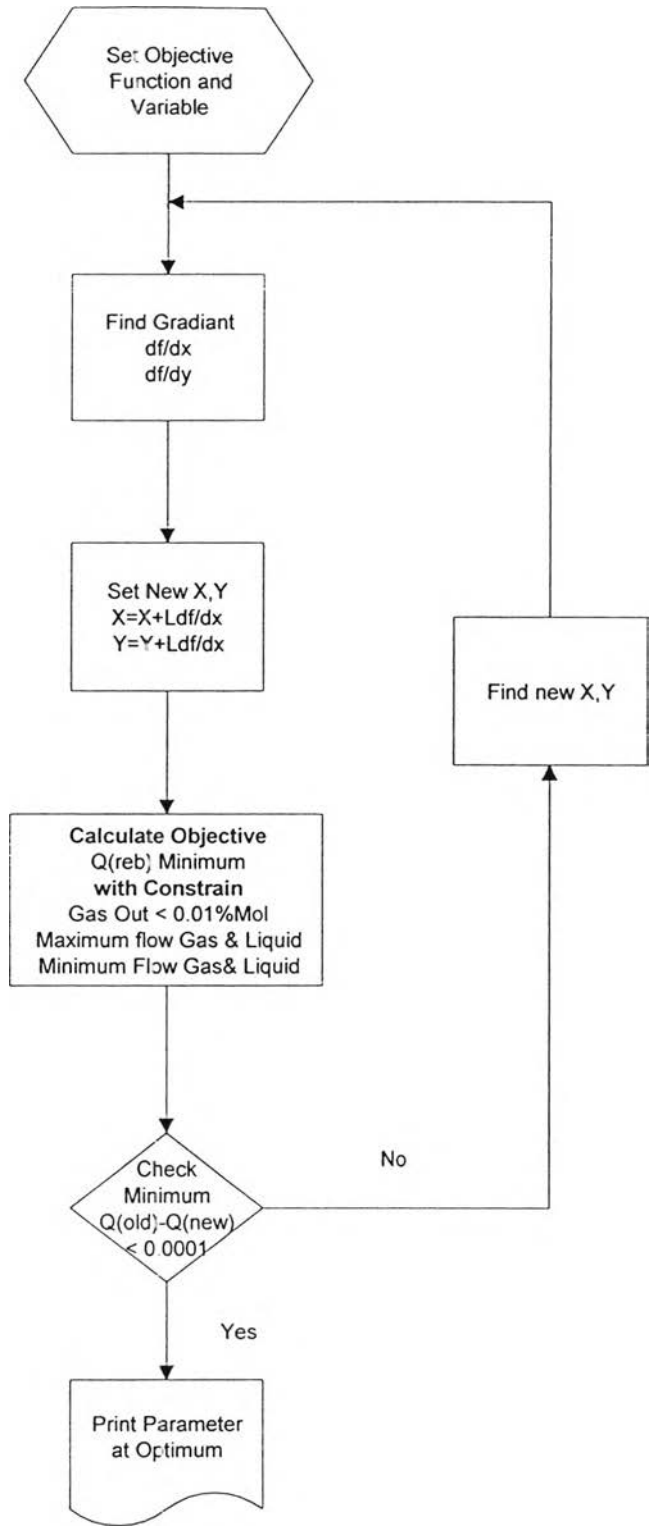
$$Q_{reboiler} \geq 0 \text{.....(4.6.2.18)}$$

$$x \geq 0 \text{.....(4.6.2.19)}$$

$$y \geq 0 \text{.....(4.6.2.20)}$$

4.6.3 **สมการวัตถุประสงค์หลัก** ในที่นี้สนใจค่าการใช้พลังงานในการดำเนินการทั้งสองหอ ถ้าดูจากการดำเนินการทั้งสองหอจะเห็นว่าค่าการใช้พลังงานส่วนใหญ่จะอยู่ที่หอฟื้นฟูสภาพเป็นหลัก นั้นคือ หม้อต้มซ้ำ (Reboiler) $Q_{reboiler}$ หม้อควบแน่น (Condenser) $Q_{condenser}$ ในการดำเนินการจริงนั้นค่าความร้อนที่ให้กับหม้อต้มซ้ำมีค่ามากกว่าค่าพลังงานในการดึงความร้อนของหม้อควบแน่นมาก ดังนั้นในที่นี้เราจึงขอพิจารณาเฉพาะหม้อต้มซ้ำเพียงเท่านั้น ดังนั้นเราสามารถกำหนดสมการวัตถุประสงค์หลักได้ดังนี้

$$Minimize : Q_{reboiler} \text{.....(4.6.2.21)}$$


Set Objective Function and Variable
Find Gradiant df/dx df/dy
Set New X,Y X=X+Ldf/dx Y=Y+Ldf/dx
Calculate Objective Q(reb) Minimum with Constrain Gas Out < 0.01%Mol Maximum flow Gas & Liquid Minimum Flow Gas& Liquid
Check Minimum Q(old)-Q(new) < 0.0001
No
Find new X,Y
Yes
Print Parameter at Optimum