

การจำลองการสังเคราะห์เอสเทอร์จากไตรเมทิลอลล์โพรเพนกับกรดไขมันจากน้ำมันปาล์ม

นายพลวิชญ์ ฤคประสิทธิ์



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)

เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของวิทยานิพนธ์ ที่ส่งผ่านทางบัณฑิตวิทยาลัย

The abstract and full text of theses from the academic year 2011 in Chulalongkorn University Intellectual Repository (CUIR)

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2557

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

SIMULATION OF ESTER SYNTHESIS FROM TRIMETHYLOLPROPANE AND PALM OIL
FATTY ACID

Mr. Pollawich Pakaprasit



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

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2014

Copyright of Chulalongkorn University

พลวิชัย ฤคประสิทธิ์ : การจำลองการสังเคราะห์เอสเทอร์จากไตรเมทิลอลโพรเพนกับกรดไขมันจากน้ำมันปาล์ม (SIMULATION OF ESTER SYNTHESIS FROM TRIMETHYLOLPROPANE AND PALM OIL FATTY ACID) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รศ. ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช, 139 หน้า.

แบบจำลองการสังเคราะห์เอสเทอร์ผสมของไตรเมทิลอลโพรเพนได้พัฒนาขึ้นด้วยระบบปฏิกิริยาอุกโฆทรานเอสเทอร์ฟิเคชัน และระบบปฏิกิริยาอุกโฆเอสเทอร์ฟิเคชัน ตามลำดับ พลังงานความร้อนและพลังงานอิสระกิบส์ของระบบปฏิกิริยาคำนวณด้วยวิธีของเบนสัน ชีตจำกัดทางทฤษฎีของระบบปฏิกิริยาทรานเอสเทอร์ฟิเคชันจำนวน 168 ปฏิกิริยา และของระบบปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันจำนวน 168 ปฏิกิริยา คำนวณด้วยแบบจำลองระบบปฏิกิริยาแบบสมดุลของโปรแกรมแอสเพนพลัส ณ อุณหภูมิ 80-140 องศาเซลเซียส และความดัน 0.1-500 มิลลิบาร์ ระบบปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันสามารถประมาณชีตจำกัดทางทฤษฎีได้ดีกว่าระบบปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ผลการทดลองการสังเคราะห์เอสเทอร์ผสมของไตรเมทิลอลโพรเพน ณ อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส เข้าใกล้ปริมาณสมดุลการสังเคราะห์เอสเทอร์ผสมของไตรเมทิลอลโพรเพน ตลอดช่วงความดันที่ศึกษา

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี

ลายมือชื่อนิสิต

สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี

ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาหลัก

ปีการศึกษา 2557

5570309321 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEYWORDS: TRIMETHYLOLPROPANE / PALM OIL FATTY ACID / TRANSESTERIFICATION /
ESTERIFICATION

POLLAWICH PAKAPRASIT: SIMULATION OF ESTER SYNTHESIS FROM
TRIMETHYLOLPROPANE AND PALM OIL FATTY ACID. ADVISOR: ASSOC. PROF.
DEACHA CHATSIRIWECH, Ph.D., 139 pp.

Synthesis of mixed esters of trimethylolpropane (TMP) was modelled with systems of equilibrium consecutive transesterification reactions and equilibrium consecutive esterification reactions, respectively. Both enthalpies of reactions and Gibb's free energies of reactions were estimated by Benson group method. The theoretical limitation of 168 transesterification reactions, as well as 168 esterification reactions, were carried out simultaneously, with the equilibrium reactor on ASPEN plus, at temperature 80-140°C and 0.1-500 mbar. The esterification system could predict the synthesis of mixed esters of TMP better than the transesterification one. The experimental results of mixed esters of TMP at 130°C approached the equilibrium limits of the esterification system for the investigated range of pressure.



Department: Chemical Engineering Student's Signature

Field of Study: Chemical Engineering Advisor's Signature

Academic Year: 2014

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สามารถสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยความช่วยเหลือจาก รองศาสตราจารย์ ดร.เดชา ฉัตรศิริเวช อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ซึ่งได้ให้คำแนะนำและความช่วยเหลือในด้านต่างๆ ที่สำคัญต่องานวิทยานิพนธ์มาโดยตลอด จึงขอขอบพระคุณมา ณ ที่นี้ ขอขอบคุณ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่อำนวยความสะดวกในการดำเนินงาน รวมถึง คณาจารย์ และเจ้าหน้าที่ประจำภาควิชาทุกท่านที่ให้ความช่วยเหลือและแนะนำ จนวิทยานิพนธ์นี้สำเร็จไปได้ด้วยดี และขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา ที่ให้การสนับสนุนในด้านการเงินและให้กำลังใจแก่ผู้วิจัยเสมอมาจนสำเร็จการศึกษา



สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญตาราง.....	ฅ
สารบัญภาพ	ฉ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ในการดำเนินการ	2
1.3 ขอบเขตของการดำเนินการ.....	3
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ.....	3
บทที่ 2 ทฤษฎีและเอกสารที่เกี่ยวข้อง	4
2.1 ปาล์มน้ำมัน.....	4
2.2 สารหล่อลื่น.....	7
2.3 การประมาณสมบัติของสาร	11
บทที่ 3 สารที่เกี่ยวข้องและวิธีการดำเนินการ	18
3.1 สารที่เกี่ยวข้อง	18
3.2 ซอฟต์แวร์ที่เกี่ยวข้อง	19
3.3 การประมาณสมบัติสาร	19
3.4 การจำลองการสังเคราะห์.....	21
บทที่ 4 การประมาณสมบัติสาร.....	27
4.1 สมบัติทั่วไปของสาร	27

4.2 สมบัติที่เกี่ยวข้องกับการประกอบสาร.....	33
บทที่ 5 การจำลองปฏิกิริยา.....	46
5.1 ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน.....	46
5.2 ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน.....	51
บทที่ 6 สรุปผลการดำเนินการ.....	61
6.1 สรุปผลการดำเนินการ.....	61
6.2 ข้อเสนอแนะ.....	61
6.3 ประโยชน์ที่ได้รับจากการดำเนินการ.....	62
รายการอ้างอิง.....	63
ภาคผนวก ก ข้อมูลการประมาณสมบัติสาร.....	65
ภาคผนวก ข การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters.....	78
ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์.....	139

สารบัญตาราง

	หน้า
ตารางที่ 2.1 สมการการประมาณสมบัติของวิธีของ Joback	12
ตารางที่ 2.2 ตัวอย่างค่า k ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Joback	13
ตารางที่ 2.3 สมการการประมาณสมบัติของวิธีของ Gani.....	14
ตารางที่ 2.4 ตัวอย่างค่า X ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Gani ลำดับที่ 1	15
ตารางที่ 2.5 สมการการประมาณสมบัติของวิธีของ Benson	17
ตารางที่ 2.6 ตัวอย่างค่า k ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Benson	17
ตารางที่ 3.1 แสดงสัดส่วนของกรดไขมันโดยน้ำหนัก (Yunus และคณะ, 2003)	18
ตารางที่ 3.2 TMP esters และปฏิกิริยาการเกิด TMP esters	23
ตารางที่ 4.1 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยในการประมาณสมบัติทั่วไปของการประมาณด้วยวิธี Joback และ Gani เมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลของหนังสือ Perry และ ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	33
ตารางที่ 4.2 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยในการประมาณสมบัติในการประกอบสารของการประมาณด้วยวิธี Joback Gani และ Benson เมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลของหนังสือ Perry และ ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	45
ตารางที่ 5.1 พลังงานอิสระกิบส์ในการเกิดปฏิกิริยาของ Triacetin และ Triolein	58
ตารางที่ ก. 1 ข้อมูลการประมาณจุดเดือดของกรดไขมัน (องศาเซลเซียส).....	66
ตารางที่ ก. 2 ข้อมูลการประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดไขมัน (องศาเซลเซียส).....	67
ตารางที่ ก. 3 ข้อมูลการประมาณความดันวิกฤติของกรดไขมัน (bar).....	68
ตารางที่ ก. 4 ข้อมูลการประมาณปริมาตรวิกฤติของกรดไขมัน (m ³ /kmol)	69
ตารางที่ ก. 5 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมัน (MJ/kmol).....	70
ตารางที่ ก. 6 ข้อมูลการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมัน (MJ/kmol).....	71

ตารางที่ ก. 7 ข้อมูลการประมาณจุดเดือดของเมทิลเอสเทอร์ (องศาเซลเซียส).....	72
ตารางที่ ก. 8 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ (MJ/kmol)	72
ตารางที่ ก. 9 ข้อมูลการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ (MJ/kmol).....	73
ตารางที่ ก. 10 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของสารต่างๆ (MJ/kmol)	73
ตารางที่ ก. 11 ข้อมูลการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของสารต่างๆ (MJ/kmol).....	74
ตารางที่ ก. 12 ข้อมูลการประมาณสารที่ใช้ในการจำลองปฏิกิริยา.....	74
ตารางที่ ข. 1 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 80 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	79
ตารางที่ ข. 2 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 100 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	82
ตารางที่ ข. 3 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	85
ตารางที่ ข. 4 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	88
ตารางที่ ข. 5 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 140 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	91
ตารางที่ ข. 6 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 500 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)	94
ตารางที่ ข. 7 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 100 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)	97
ตารางที่ ข. 8 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 50 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	100
ตารางที่ ข. 9 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม).....	103

สารบัญภาพ

	หน้า
ภาพที่ 1.1 แสดงโครงสร้างของไตรเมทิลอลโพรเพน (TMP).....	1
ภาพที่ 1.2 แสดงการสังเคราะห์ TMP esters	2
ภาพที่ 2.1 โครงสร้างของไตรกรีเซอไรด์	9
ภาพที่ 2.2 โครงสร้างของ TMP esters.....	10
ภาพที่ 2.3 การจำแนกและนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตต ด้วยวิธีของ Joback.....	12
ภาพที่ 2.4 การจำแนกและนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตต ด้วยวิธีของ Gani.....	14
ภาพที่ 2.5 การจำแนกและนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตต ด้วยวิธีของ Benson	16
ภาพที่ 3.1 โครงสร้างโมเลกุล (ก) Mono-esters (ข) Di-esters (ค) Tri-esters.....	19
ภาพที่ 3.2 แผนผังการจำลองการสังเคราะห์ TMP ester ด้วยปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชั่น.....	21
ภาพที่ 4.1 การเปรียบเทียบการประมาณจุดเดือดของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	28
ภาพที่ 4.2 การเปรียบเทียบการประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	29
ภาพที่ 4.3 การเปรียบเทียบการประมาณความดันวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	30
ภาพที่ 4.4 การเปรียบเทียบการประมาณปริมาตรวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	31
ภาพที่ 4.5 การเปรียบเทียบการประมาณจุดเดือดของเมทิลเอสเทอร์ของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลของหนังสือ Perry.....	32
ภาพที่ 4.6 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	34
ภาพที่ 4.7 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus	35

ภาพที่ 4.8 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	35
ภาพที่ 4.9 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมัน ด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	36
ภาพที่ 4.10 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมัน ด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	37
ภาพที่ 4.11 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมัน ด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	37
ภาพที่ 4.12 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วย วิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	38
ภาพที่ 4.13 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วย วิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	39
ภาพที่ 4.14 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วย วิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	39
ภาพที่ 4.15 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอส เทอร์ด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	40
ภาพที่ 4.16 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอส เทอร์ด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	41
ภาพที่ 4.17 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ ด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus.....	41
ภาพที่ 4.18 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ประกอบสารของอัลเคนด้วยวิธี ต่างๆ กับข้อมูลในหนังสือของ Perry.....	42
ภาพที่ 4.19 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประมาณสารของสารต่างๆ ด้วยวิธี ของ Joback Gani และ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ; X1/Ethyl acetate, X2/Ethyl propionate, X3/Ethyl butyrate, X4/Propyl acetate, X5/Butyl acetate, Y1/Glycerol, Y2/Triacetin, Y3/Triolein, Z/TMP.....	43

ภาพที่ 4.20 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของสารต่างๆ ด้วยวิธีของ Joback Gani และ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ; X1/Ethyl acetate, X2/Ethyl propionate, X3/Ethyl butyrate, X4/Propyl acetate, X5/Butyl acetate, Y1/Glycerol, Y2/Triacetin, Y3/Triolein, Z/TMP	44
ภาพที่ 5.1 ปริมาณของ POME ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	47
ภาพที่ 5.2 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	47
ภาพที่ 5.3 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	48
ภาพที่ 5.4 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	48
ภาพที่ 5.5 ปริมาณของ POME ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	49
ภาพที่ 5.6 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	50
ภาพที่ 5.7 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	50
ภาพที่ 5.8 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	51
ภาพที่ 5.9 ปริมาณของ POFA ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	52
ภาพที่ 5.10 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	53
ภาพที่ 5.11 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ	53

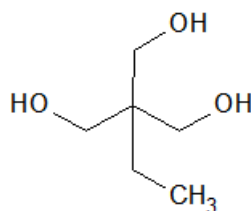
ภาพที่ 5.12 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิ เคชั่นเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ.....	54
ภาพที่ 5.13 ปริมาณของ POFA ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิ เคชั่นเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ.....	55
ภาพที่ 5.14 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิ เคชั่นเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ.....	55
ภาพที่ 5.15 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิ เคชั่นเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ.....	56
ภาพที่ 5.16 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิ เคชั่นเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ.....	56
ภาพที่ 5.17 ปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส	57
ภาพที่ 5.18 ปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซล.....	57
ภาพที่ 5.19 ปฏิกิริยาระหว่างแอลกอฮอล์กับโซเดียมไดออกไซด์	58
ภาพที่ 5.20 ปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส	59
ภาพที่ 5.21 แผนผังปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างการสังเคราะห์ TMP esters	60
ภาพที่ 5.22 พลังงานอิสระกิบส์ของเมทิลเอสเทอร์และกรดไขมัน	60

บทที่ 1 บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

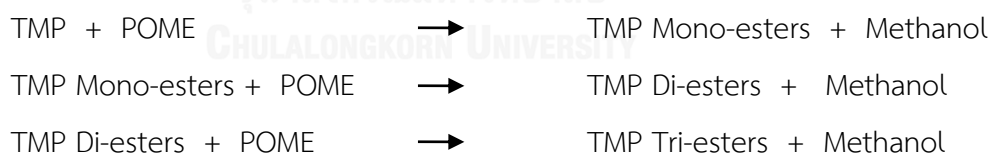
การใช้ผลิตภัณฑ์จากพืชมาทดแทนผลิตภัณฑ์จากปิโตรเลียมเป็นที่นิยมในปัจจุบัน และน้ำมันจากปาล์มสามารถใช้ผลิตเป็นสารหล่อลื่นได้ สมบัติของสารหล่อลื่นจากน้ำมันปาล์มไม่ด้อยกว่าสารหล่อลื่นจากปิโตรเลียม (Krishna, Kabra, Kunchum & Vijayakumar, 2014: 1-5) อีกทั้งเป็นมิตรต่อสิ่งแวดล้อม มีการศึกษาพบว่าสารหล่อลื่นจากน้ำมันปาล์มปล่อยสารคาร์บอนมอนอกไซด์และสารไฮโดรคาร์บอนที่เป็นผลเสียต่อบรรยากาศน้อยกว่าสารหล่อลื่นจากปิโตรเลียม (Masjuki, Maleque, Kubo & Nonaka, 1999: 305-314) แต่อย่างไรก็ตาม สมบัติของน้ำมันปาล์มที่ไม่ผ่านการปรับปรุงคุณภาพไม่เหมาะนำมาใช้เป็นสารหล่อลื่นโดยตรง ควรนำน้ำมันปาล์มไปปรับปรุงคุณภาพก่อนจึงจะสามารถนำมาใช้เป็นสารหล่อลื่นที่ดีได้

ประเทศไทยเป็นประเทศหนึ่งที่เพาะปลูกปาล์มน้ำมันเป็นจำนวนมากเพื่อใช้ในงานด้านต่างๆ มีอัตราการเติบโตผลผลิต และมีราคาถูกลง การนำน้ำมันปาล์มมาผลิตเป็นสารหล่อลื่นจึงเป็นการเพิ่มมูลค่าให้แก่น้ำมันปาล์มทางเลือกหนึ่ง การผลิตสารหล่อลื่นได้ด้วยน้ำมันปาล์มย่อมเพิ่มมูลค่าทางการเกษตรให้สูงขึ้น และเป็นผลดีต่อผู้ค้าน้ำมันปาล์ม ไตรเมทิลอลโพรเพนเอสเทอร์ (Trimethylolpropane esters, TMP esters) เป็นสารหล่อลื่นสังเคราะห์ชนิดหนึ่ง มีคุณภาพดี และสามารถผลิตได้จากการนำกรดไขมันน้ำมันปาล์มมาทำปฏิกิริยากับไตรเมทิลอลโพรเพน (Trimethylolpropane, TMP) (Yunus, Fakhru'l-Razi, Ooi, Iyuke & Perez, 2004: 52-60) โดยโครงสร้างของ TMP เป็นดังภาพที่ 1.1 นอกจากนี้สารหล่อลื่นชนิดนี้มีสมบัติของผลิตภัณฑ์หล่อลื่นที่สามารถนำมาใช้ทดแทนผลิตภัณฑ์ที่มาจากปิโตรเลียมได้ เช่น การนำ TMP esters จากน้ำมันปาล์มมาผสมกับสารหล่อลื่นเพิ่มความต้านทานการสึกหรอในเครื่องยนต์ (Zulkifli, Kalam, Masjuki, Shahabuddin & Yunus, 2013: 167-173)



ภาพที่ 1.1 แสดงโครงสร้างของไตรเมทิลอลโพรเพน (TMP)

ในการผลิต TMP esters เพื่อโอกาสทางธุรกิจจำเป็นต้องผลิตปริมาณมากเพื่อนำเข้าสู่ตลาด การทดลองการผลิตอาจทำให้สิ้นเปลืองเงินทอง การนำคอมพิวเตอร์มาช่วยจำลองการผลิตจึงเป็นทางเลือกหนึ่งที่เหมาะสม การใช้ซอฟต์แวร์คอมพิวเตอร์สามารถประมาณหรือทำนายผลลัพธ์ที่เกิดขึ้นของการทดลองจริงได้ เช่น งานของ Garcia, Gonzalo, Sanchez, Arauzo & Pena (2010: 4431-4439) ทำนายสมบัติของไบโอดีเซลโดยการจำลองการผลิตไบโอดีเซล หรือ ออกแบบกระบวนการการผลิต เช่น การออกแบบการผลิตไบโอดีเซลจากน้ำมันเหลือใช้จากการทำอาหาร (Zhang, Dube, McLean & Kates, 2003: 1-16) ในงานนี้จึงได้ทำการจำลองการสังเคราะห์ TMP esters โดยใช้สภาวะเดียวกันกับการทดลองของ Yunus, Fakhru'l-Razi, Ooi, Iyuke & Idris (2003: 35-41) ได้แก่ อุณหภูมิ และ ความดัน ซึ่งการทดลองเป็นปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน (Transesterification) TMP ทำปฏิกิริยากับเมทิลเอสเทอร์จากน้ำมันปาล์ม (Palm oil methyl esters, POME) ปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters แสดงดังภาพที่ 1.2 นอกจากนี้งานนี้ได้เพิ่มการจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชันซึ่งเกิดจากกรดไขมันจากน้ำมันปาล์มทำปฏิกิริยากับ TMP ได้ผลิตภัณฑ์เป็น TMP esters กับน้ำ โดยมองจากความเป็นไปได้ของการผลิตไบโอดีเซลโดยใช้ปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชันเป็นทางเลือก (Chongkhong, Tongurai, Chetpattananondh & Bunyakan, 2007: 563-568)



ภาพที่ 1.2 แสดงการสังเคราะห์ TMP esters

1.2 วัตถุประสงค์ในการดำเนินการ

จำลองการสังเคราะห์เอสเทอร์จากไตรเมทิลอลโพรเพนกับกรดไขมันจากน้ำมันปาล์มโดยการจำลองปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน และปฏิกิริยาเอสเทอร์ิฟิเคชัน แบบสมดุล โดยใช้ซอฟต์แวร์คอมพิวเตอร์ ASPEN Plus

1.3 ขอบเขตของการดำเนินการ

- 1.3.1 ประมาณสมบัตินสาร กรดไขมัน และ เมทิลเอสเทอร์ และคัดเลือกวิธีการประมาณสมบัติของสาร ตามสมบัติ ดังนี้
 - 1.3.1.1 ประมาณสมบัติทั่วไป ได้แก่ วิธีของ Joback และ Gani
 - 1.3.1.2 ประมาณสมบัติในการประกอบ ได้แก่ วิธีของ Joback Gani และ Benson
- 1.3.2 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters แบ่งการจำลองออกเป็น 2 ลักษณะ ดังนี้
 - 1.3.2.1 อุณหภูมิ จำลองที่อุณหภูมิ 80 – 130 องศาเซลเซียส ความดันคงที่ที่ 10 มิลลิบาร์
 - 1.3.2.2 ความดัน จำลองที่ความดัน 0.1 – 500 มิลลิบาร์ อุณหภูมิคงที่ที่ 130 องศาเซลเซียส

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

- 1.4.1 เข้าใจกลไกในการสังเคราะห์ TMP esters มากขึ้น
- 1.4.2 สามารถช่วยเพิ่มประสิทธิภาพในการสังเคราะห์ TMP esters ซึ่งเป็นทางเลือกในการนำน้ำมันปาล์มไปเพิ่มมูลค่า
- 1.4.3 เพิ่มแนวทางการทดลองสังเคราะห์ TMP esters โดยใช้การจำลองปฏิกิริยาด้วยซอฟต์แวร์คอมพิวเตอร์

บทที่ 2 ทฤษฎีและเอกสารที่เกี่ยวข้อง

2.1 ปาล์มน้ำมัน

ข้อมูลทั่วไปของปาล์มน้ำมัน (ศูนย์วิจัยปาล์มน้ำมันสุราษฎร์ธานี, 3 ธันวาคม 2557)

ปาล์มน้ำมันมีต้นกำเนิดอยู่ทางแถบแอฟริกากลาง และตะวันตก ชื่อทางวิทยาศาสตร์คือ *Elaeis guineensis* Jacq. เป็นพืชเศรษฐกิจที่สำคัญ ปลูกมากในประเทศมาเลเซีย อินโดนีเซีย และไทย ปลูกได้ในพื้นที่เขตร้อนชื้น ปาล์มน้ำมันเป็นพืชใบเลี้ยงเดี่ยว ยืนต้น เป็นพืชผสมข้าม มีดอกเพศผู้และเพศเมียอยู่บนลำต้นเดียวกัน หลังจากปลูกแล้วปาล์มน้ำมันสามารถให้ผลใน 30 เดือน ลำต้นจะโตเต็มที่ 5 ปีขึ้นไป มีระยะเก็บเกี่ยวทุกๆ 15 วัน ปาล์มน้ำมันสามารถให้น้ำมันได้ 2 ส่วน คือ น้ำมันในผลปาล์ม (palm oil) และ น้ำมันในเมล็ด (palm kernel oil)

การแปรรูปปาล์มน้ำมัน

การแปรรูปน้ำมันปาล์มแบ่งออกเป็น 2 กระบวนการหลัก คือ

1. กระบวนการสกัดน้ำมันปาล์ม (Mill Processing)

กระบวนการสกัดน้ำมันปาล์มแยกออกเป็น 2 แบบ คือ แบบมาตรฐาน (หีบน้ำมันแยก) ซึ่งน้ำมันจากการสกัดแบบมาตรฐานนี้จะมีคุณภาพดี เนื่องจากการสกัดแยกระหว่างน้ำมันปาล์มจากผลกับน้ำมันปาล์มจากเมล็ด แบบหีบน้ำมันผสม เป็นการสกัดน้ำมันปาล์มจากผลและเมล็ดรวมกัน คุณภาพต่ำกว่า การสกัดแบบมาตรฐานมีขั้นตอนดังนี้

- 1.1 การอบทะลายด้วยไอน้ำ (Sterilization) อบผลปาล์มที่อุณหภูมิ 130 – 135 องศาเซลเซียส ความดัน 2.5 – 3 บาร์ ประมาณ 50 - 75 นาที ขั้นตอนนี้ทำให้ผลปาล์มอ่อนนุ่มสามารถหลุดจากขั้วผลได้ง่าย เนื่องจากการอบทะลายช่วยลดปฏิกิริยาไลโปไลซิสที่ทำให้เกิดกรดไขมันอิสระในผลของปาล์มน้ำมัน
- 1.2 การแยกผล (Striping) เป็นขั้นตอนแยกผลปาล์มออกจากทะลาย จากนั้นนำผลปาล์มที่ได้ไปเข้าเครื่องย่อยเพื่อแยกผลปาล์มกับเมล็ด
- 1.3 การสกัดน้ำมัน (Oil extraction) นำผลปาล์มที่แยกออกอบที่อุณหภูมิ 90 – 100 องศาเซลเซียส นาน 20 – 30 นาที จากนั้นนำเข้าเครื่องหีบจะได้น้ำมันปาล์มดิบ

1.4 การทำความสะอาดน้ำมันปาล์มดิบ (Clarification) เป็นการทำความสะอาดน้ำมันปาล์มดิบโดยการกรองแยกของแข็ง เข้าเครื่องเหวี่ยงแยก และไล่น้ำออก

2. กระบวนการกลั่นบริสุทธิ์น้ำมันปาล์ม (Refine processing)

กระบวนการกลั่นทำให้น้ำมันปาล์มเหมาะกับการนำไปบริโภค โดยการกลั่นจะแบ่งออกเป็น

2 วิธี ได้แก่

2.1 วิธีทางกายภาพ (Physical or steam refining) ขั้นตอนแรกต้องทำการเตรียมน้ำมันปาล์มดิบโดยการกำจัดฟอสโฟไลปิด (Phospholipids) ออก นำน้ำมันปาล์มดิบมาทำปฏิกิริยากับกรดฟอสฟอริกที่ความเข้มข้น 80 – 85 เปอร์เซ็นต์ ประมาณ 0.05 – 0.2 ของน้ำมันปาล์มดิบที่อุณหภูมิ 90 – 100 องศาเซลเซียส ระยะเวลา 15 – 30 นาที จากนั้นฟอกสีด้วยผงฟอกสี (Bleaching earth) เป็นเวลา 30 – 45 นาที ที่อุณหภูมิ 95 – 100 องศาเซลเซียสในสภาวะสุญญากาศ จะได้น้ำมันปาล์มที่ไม่มีฟอสโฟไลปิด นำน้ำมันปาล์มที่ได้มาทำการกลั่นต่อไปโดยกลั่นที่อุณหภูมิ 240 – 270 องศาเซลเซียส ภายใต้สภาวะสุญญากาศ เวลา 1 – 2 ชั่วโมง จะได้น้ำมันปาล์มบริสุทธิ์ (Refined Bleached and Deodorized Palm Oil, RBD PO)

2.2 วิธีทางเคมี (Chemical refining) เป็นกระบวนการกำจัดกรดไขมันอิสระโดยการทำปฏิกิริยาเคมีกับสารละลายต่างให้เกิดสบู่ แล้วทำการเหวี่ยงแยกสบู่ออกไปจากน้ำมัน จากนั้นล้างไขมันด้วยน้ำ และให้ความร้อนแก่น้ำมันเพื่อไล่น้ำออก ตามด้วยการฟอกสีและกำจัดกลิ่นด้วยไอน้ำ จะได้น้ำมันปาล์ม Neutralized Bleached and Deodorized Palm oil

การนำน้ำมันปาล์มไปใช้ประโยชน์

1. ไบโอดีเซล (Biodiesel) เป็นเชื้อเพลิงที่สามารถใช้ทดแทนน้ำมันดีเซลได้ดี เนื่องจากเป็นเชื้อเพลิงสะอาด สลายตัวได้ง่าย และไม่เป็นพิษ การผลิตไบโอดีเซลทำได้โดยนำน้ำมันปาล์มมาทำปฏิกิริยากับเมทานอลหรือเอทานอล ทำให้เกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชัน (Transesterification) ผลิตภัณฑ์ที่ได้คือเมทิลเอสเทอร์ (Methyl ester) ซึ่งมีสมบัติใกล้เคียงกับน้ำมันดีเซลมาก ผลพลอยได้จากการผลิตนี้ยังทำให้เกิดกลีเซอริน (Glycerine) สามารถแยกออกเพื่อนำไปใช้ประโยชน์ในด้านอื่นๆ ได้ เช่น อุตสาหกรรมยา และเครื่องสำอาง เป็นต้น

2. อุตสาหกรรมอาหาร การนำน้ำมันปาล์มมาใช้ในการผลิตอาหารมีมากกว่า 5000 ปี น้ำมันปาล์มมีคุณค่าทางโภชนาการ รูปแบบการนำมาใช้มีหลายรูปแบบทั้งการนำน้ำมันปาล์มมาใช้ในการทอด อบ นึ่ง การตัดแปลงน้ำมันปาล์มเพื่อใช้เป็นเครื่องปรุงหรือวัตถุดิบในการปรุงอาหาร เช่น เนยเทียม ครีมเทียม รวมไปถึงการใช้ในอุตสาหกรรมอาหารสัตว์

3. สบู่ การผลิตสบู่เกิดจากปฏิกิริยา Saponification โดยการนำเอาน้ำมันปาล์มทำปฏิกิริยากับ โซเดียมไฮดรอกไซด์ (NaOH) มีความสามารถในการทำความสะอาดชำระล้างได้ดี

4. วิตามิน อี (Vitamin E) ในน้ำมันปาล์มมีวิตามินอีเป็นส่วนประกอบ วิตามินอีเป็นสารต้านอนุมูลอิสระ จึงมีการสกัดวิตามินอีจากน้ำมันปาล์มเพื่อผลิตอาหารเสริม

5. อุตสาหกรรมโอเลโอเคมีคอล (Oleochemical Industry) น้ำมันปาล์มสามารถนำมาผลิตเป็นสารโอเลโอเคมีคอลได้หลากหลายชนิด ได้แก่

5.1 กรดไขมัน (Fatty acid) ได้จากการนำน้ำมันปาล์มไปทำการแตกตัวที่อุณหภูมิและความดันสูง กรดไขมันสามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้หลากหลาย เช่น การผลิตเครื่องสำอาง สบู่ เทียนไข สารหล่อลื่น

5.2 เอสเทอร์ของกรดไขมัน (Fatty acid esters) สามารถสังเคราะห์เอสเทอร์ด้วย 2 ปฏิกิริยาดังกล่าว ได้แก่ ปฏิกิริยาเอสเทอริฟิเคชัน (Esterification) เกิดจากการทำปฏิกิริยาระหว่างกรดไขมันและแอลกอฮอล์ และปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชัน (Transesterification) เป็นการทำปฏิกิริยาระหว่างไตรกลีเซอไรด์ (Triglyceride) กับแอลกอฮอล์

5.3 เมทิลเอสเทอร์ (Methyl ester) เกิดจากปฏิกิริยาเอสเทอริฟิเคชัน และทรานส์เอสเทอริฟิเคชัน สามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้หลายอย่าง เช่น การนำไปใช้เป็นสารตั้งต้นของสารอื่น ใช้เป็นพลังงานทดแทนไบโอดีเซล ใช้ผลิตสารหล่อลื่น ผลิตภัณฑ์ซักฟอก เป็นต้น

5.4 แอลกอฮอล์ (Fatty alcohol) ผลิตจากการนำกรดไขมันมาเติมไฮโดรเจนที่อุณหภูมิสูง สามารถใช้ในการผลิตสารลดแรงตึงผิว รวมถึงเป็นส่วนประกอบในการผลิตสารที่สามารถป้องกันการระเหยน้ำได้

2.2 สารหล่อลื่น

สารหล่อลื่นเป็นสารชนิดหนึ่ง ที่ทั่วไปใช้ฉาบระหว่างของแข็งที่เคลื่อนที่สวนทางกัน เพื่อลดความร้อน หรือการสึกกร่อนที่เกิดขึ้นจากการเสียดสี (Honary & Richter, 2011: 1-8) ต้นกำเนิดของสารหล่อลื่นไม่เป็นที่แน่ชัด คาดว่าน้ำมันหล่อลื่นเริ่มต้นใช้ในประเทศอียิปต์ โดยการนำไขมันสัตว์ และน้ำมันพืชมาใช้หล่อลื่นเพื่อขนส่งหินขนาดใหญ่ในการสร้างพีระมิด เมื่อมีการนำระบบล้อมาใช้ในการขนส่ง สารหล่อลื่นจึงถูกใช้อย่างแพร่หลาย เช่น การหล่อลื่นในรถเทียมม้า หลังการปฏิวัติอุตสาหกรรม ความต้องการใช้สารหล่อลื่นเพิ่มขึ้นเป็นอย่างมาก สารหล่อลื่นที่เกิดจากไขมันสัตว์ และน้ำมันพืชทั้งหลายได้ถูกพัฒนาขึ้นจนถึงขีดความสามารถ ทำให้เครื่องจักรรุ่นใหม่ที่ถูกพัฒนาขึ้นในขณะนั้น ต้องการสารหล่อลื่นที่มีประสิทธิภาพมากกว่าเดิม สารหล่อลื่นจากธรรมชาติมีคุณสมบัติไม่เพียงพอทำให้เครื่องจักรเกิดการสึกกร่อน ในช่วงปลายศตวรรษที่ 19 สารไฮโดรคาร์บอนจากปิโตรเลียมเริ่มถูกใช้อย่างแพร่หลาย และค่อยๆ ถูกนำมาทดแทนผลิตภัณฑ์จากธรรมชาติ ในที่สุดก็ได้พัฒนาสารไฮโดรคาร์บอนจากปิโตรเลียมมาผลิตเป็นสารหล่อลื่นขึ้น ในปีทศวรรษที่ 1980 นักวิจัยประเทศยุโรปได้รับการสนับสนุนจากกลุ่มกิจการให้เริ่มต้นนำผลิตภัณฑ์ทางการเกษตรมาวิจัยเพื่อใช้ในอุตสาหกรรม จากนั้นบริษัทอื่นๆ ในหลายประเทศจึงได้มีแนวคิดในการผลิตผลิตภัณฑ์ที่ย่อยสลายได้ตามธรรมชาติขึ้น จากการตระหนักถึงภาวะโลกร้อน และการคาดการณ์ของน้ำมันปิโตรเลียมที่จะหมดไปในอีก 100 ปีข้างหน้า

ชนิดของสารหล่อลื่น (Shell Lubricants, 16 April 2015)

สารหล่อลื่นโดยทั่วไป สามารถแบ่งออกตามที่มาได้ 3 ชนิด ดังนี้

1. สารหล่อลื่นจากน้ำมันพืช หรือ ไขมันสัตว์ (Vegetable or animal oil) เป็นน้ำมันหล่อลื่นที่ใช้กันตั้งแต่ในอดีต มีความต้านทานการเกิดออกซิเดชันต่ำจึงเสื่อมสภาพได้ง่าย จึงต้องนำไปปรับปรุงคุณภาพ ซึ่งจะทำให้มีราคาแพงจึงไม่ค่อยนิยม
2. สารหล่อลื่นจากปิโตรเลียม (Mineral oil) เป็นน้ำมันหล่อลื่นที่ใช้ในปัจจุบัน มีคุณภาพดีและราคาถูก มีการนำมาปรับปรุงคุณภาพให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น
3. สารหล่อลื่นสังเคราะห์ (Synthetic oil) เป็นสารหล่อลื่นที่สังเคราะห์มาจากน้ำมันปิโตรเลียมหรือจากพืช เพื่อใช้ในงานบางอย่างโดยเฉพาะ ตามสมบัติที่ต้องการ เช่น มีดัชนีความหนืดสูง การระเหยต่ำ ความต้านทานการเกิดออกซิเดชันสูง จุดไหลเทต่ำ เป็นต้น จึงค่อนข้างมีราคาแพง

ศักยภาพของสารหล่อลื่น (Honary & Richter, 2011: 103-124)

งานแต่ละงาน ใช้สารหล่อลื่นที่มีสมบัติแตกต่างกัน จึงมีการกำหนดมาตรฐาน และวิธีวัดคุณสมบัติเหล่านั้นเพื่อบอกถึงศักยภาพของสารหล่อลื่นเหล่านั้น

1. ความหนืด (Viscosity) คือ สมบัติการต้านทานการไหล เป็นสมบัติสำคัญของสารหล่อลื่นทุกชนิด ความหนืดวัดโดยมาตรฐาน ASTM D445 แสดงผลเป็นความหนืดเชิงจลน์ (Kinematic viscosity) หน่วยของความหนืดเชิงจลน์ที่นิยม คือ เซนติสโตก (cSt) ความหนืดเปลี่ยนแปลงไปตามอุณหภูมิ เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นความหนืดจะลดลง จึงมีการกำหนดมาตรฐานเพื่อระบุค่าการต้านทานการเปลี่ยนแปลงความหนืดในการเปลี่ยนอุณหภูมิ เรียกว่า ดัชนีความหนืด (Viscosity Index, VI) โดยใช้วิธี ASTM D2270 ในการวัด

2. จุดวาบไฟ (Flash point) เป็นอุณหภูมิต่ำที่สุดจุดแรกที่ทำให้น้ำมันเกิดการระเหย และไอสามารถทำให้ติดไฟ ใช้วิธีการ ASTM D 92 ในการทดสอบ ทั้งน้ำมันพืชและน้ำมันปิโตรเลียมใช้วิธีนี้ในการทดสอบ ส่วนใหญ่น้ำมันพืชจะมีจุดวาบไฟสูงกว่าน้ำมันปิโตรเลียม

3. การระเหย (Volatility) ทดสอบโดยใช้วิธี ASTM D972 โดยทั่วไปในงานหล่อลื่นนิยมใช้สารหล่อลื่นที่มีค่าการระเหยน้อยเพื่อป้องกันอันตรายจากเพลิงไหม้ โดยเฉพาะอย่างยิ่งงานที่เกี่ยวข้องกับโลหะ น้ำมันพืชส่วนใหญ่จะมีค่าการระเหยน้อยกว่าน้ำมันปิโตรเลียมถ้าความหนืดเท่ากัน

4. จุดไหลเท (Pour point) เป็นอุณหภูมิที่ของเหลวหยุดการไหล วัดโดยใช้มาตรฐานวิธี ASTM D97 สารหล่อลื่นควรมีจุดไหลเทต่ำ

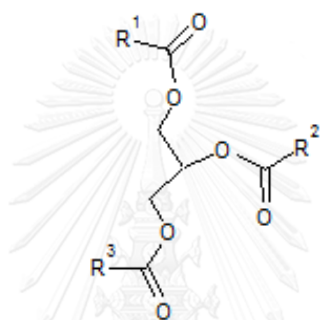
5. ความหนาแน่น (Density) วัดโดยใช้วิธี ASTM D4502

6. ความต้านทานการเกิดออกซิเดชัน (Oxidation stability) การเกิดออกซิเดชันในสารหล่อลื่นทำให้อายุของสารหล่อลื่นลดลง ซึ่งอัตราการเกิดออกซิเดชันจะสูงขึ้นเมื่ออยู่ทำงานในอุณหภูมิสูง รวมทั้งการสัมผัสกับน้ำ หรืออากาศ วิธีการวัดความต้านทานการเกิดออกซิเดชันมีหลายวิธี แต่วิธีที่นิยมสำหรับใช้วัดผลิตภัณฑ์ปิโตรเลียม คือ วิธี Rotary Bomb Oxidation Test (RBOT)

7. การป้องกันการสึกกร่อน (Wear prevention) เป็นสมบัติหนึ่งของสารหล่อลื่น การทำงานในงานที่เกี่ยวข้องกับการเสียดสีของโลหะ สารหล่อลื่นจะช่วยป้องกันหรือลดแรงเสียดทาน และการสึกกร่อนที่เกิดขึ้นได้ จึงมีการวัดศักยภาพการป้องกันการสึกกร่อนของสารหล่อลื่นโดยใช้วิธี ASTM D 4172 โดยเรียกกันว่า “Four Ball Wear Test”

สารหล่อลื่นจากน้ำมันพืช

การนำน้ำมันพืชมาผลิตเป็นเชื้อเพลิงนิยมมากในหลายปีที่ผ่านมา ทำให้การศึกษาพัฒนาสารหล่อลื่นจากน้ำมันพืชเพิ่มขึ้นตาม ส่วนประกอบที่สำคัญของน้ำมันพืช คือ ไตรกรีเซอไรด์ (Triglyceride) ซึ่งเป็นสารประกอบเอสเทอร์ของกรีเซอร์ออลและกรดไขมัน โครงสร้างของไตรกรีเซอไรด์เป็นดังภาพที่ 2.1 กรดไขมันในน้ำมันพืชส่วนใหญ่จะประกอบไปด้วยกรดไขมันที่มีคาร์บอน 10 – 18 อะตอม น้ำมันพืชสามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้หลายด้าน อีกทั้งสามารถปลูกและให้ผลผลิตได้ในเวลาไม่นาน การนำน้ำมันพืชมาผลิตเป็นสารหล่อลื่นจึงเป็นทางเลือกที่ดี



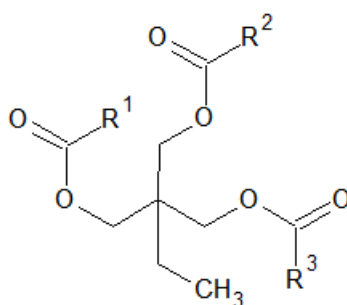
ภาพที่ 2.1 โครงสร้างของไตรกรีเซอไรด์

เอสเทอร์จากไตรเมทิลอลโพรเพน (Trimethylolpropane esters, TMP esters)

TMP esters เป็นสารประกอบชนิดหนึ่งที่มีคุณสมบัติของการเป็นสารหล่อลื่นที่ดี เป็นสารหล่อลื่นสังเคราะห์ จากการที่ได้กล่าวไปข้างต้นเกี่ยวกับสมบัติของสารหล่อลื่น TMP esters มีสมบัติที่เหมาะสมสำหรับการเป็นสารหล่อลื่น TMP esters สามารถสังเคราะห์ได้จากกรดไขมันของไตรกรีเซอไรด์ ทำให้มีคุณภาพดีขึ้น ดังนี้ (Krzan & Vizintin, 2004: 58-62)

1. มีความต้านทานการเกิดออกซิเดชันที่ดีกว่าไตรกรีเซอไรด์ซึ่งทำให้อายุการใช้งานยาวนาน
2. ช่วยลดแรงเสียดทาน และป้องกันการสึกหรอได้ดีกว่ามาก

นอกจากนี้ยังสามารถใช้ในงานที่มีความกว้างของช่วงอุณหภูมิสูง เช่น ในเครื่องบินไอพ่น (Schaefer, 22 Jun 2015) ลักษณะโครงสร้างของ TMP esters แสดงดังภาพที่ 2.2 TMP esters เกิดจากการทำปฏิกิริยาระหว่าง กรดไขมันเมทิลเอสเทอร์กับสารประกอบไตรเมทิลอลโพรเพน (Trimethylolpropane, TMP) ในสภาวะสูญญากาศ ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอริฟิเคชัน (Transesterification)



ภาพที่ 2.2 โครงสร้างของ TMP esters

ในงานวิจัยของ Yunus, Fakhru'l-Razi, Ooi, Iyuke & Perez. (2004: 52-60) ได้ทำการศึกษาเกี่ยวสมบัติการเป็นสารหล่อลื่นของ TMP ester ที่สังเคราะห์จากกรดไขมันจากน้ำมันปาล์ม และเมล็ดในปาล์ม ได้แก่ จุดไหลเท ความหนืดเชิงจลน์และดัชนีความหนืด และความต้านการเกิดออกซิเดชัน

1. จุดไหลเท

การวัดค่าจุดไหลเทของ TMP ester ในงานวิจัยของ Yunus et al. ใช้วิธี ASTM D97 พบว่าจุดไหลเทของของ TMP esters มีจุดไหลเทที่ประมาณ 3 องศาเซลเซียส TMP esters จากน้ำมันปาล์ม และเมล็ดในปาล์มมีจุดไหลเทสูงกว่าน้ำมันอื่นๆ อย่างไรก็ตามน้ำมันปาล์มที่มีกรดโอเลอิกสูงเมื่อนำมาสังเคราะห์ TMP esters มีจุดไหลเทต่ำถึง -33 องศาเซลเซียส

2. ความหนืดเชิงจลน์และดัชนีความหนืด

การศึกษสมบัติของ TMP esters จากน้ำมันปาล์มทำการวัดความหนืดโดยวิธีการของ ASTM D445 และดัชนีความหนืดโดยวิธีการของ ASTM D2270 TMP esters พบว่า TMP esters จากน้ำมันปาล์ม มีความความหนืดน้อยกว่าสารหล่อลื่นจากปิโตรเลียมทั่วไป แต่ยังคงมีคุณสมบัติของสารหล่อลื่นที่ดี อีกทั้งยังมีค่าดัชนีความหนืดที่สูง ดังนั้นจึงมีความต้านทานในการเปลี่ยนแปลงความหนืดเมื่ออุณหภูมิเปลี่ยนไป

3. ความต้านทานการเกิดออกซิเดชัน

การทดสอบกระทำโดยใช้วิธี Penn State Micro-oxidation Test (PSMO) เปรียบเทียบกันระหว่าง TMP ester ของน้ำมันปาล์ม กับ น้ำมันพืชโอเลอิกสูง พบว่าTMP ester มีค่าการระเหยมากกว่าเล็กน้อยแต่เกิดออกซิเดชันน้อยกว่าอย่างเห็นได้ชัด

การศึกษาของ Yunus และคณะ สรุปได้ว่า TMP esters มีสมบัติที่เหมาะสมในการนำมาใช้เป็นสารหล่อลื่น ไม่ว่าจะเป็นเรื่องความหนืด ดัชนีความหนืด จุดไหลเท และความต้านทานการเกิดออกซิเดชัน

2.3 การประมาณสมบัติของสาร

ในงานวิศวกรรมเคมี สมบัติของสารจำเป็นอย่างมากในการกระทำสิ่งต่างๆ ไม่ว่าจะเป็นการทดลอง การออกแบบกระบวนการ สมบัติของสารนำมาใช้การคำนวณทั้งสิ้น สมบัติทางกายภาพ (Physical properties) ที่สำคัญของสาร ได้แก่ จุดเดือด จุดหลอมเหลว อุณหภูมิวิกฤติ ความดันวิกฤติ ปริมาตรวิกฤติ เป็นต้น สมบัติที่ขึ้นกับอุณหภูมิและความดัน ได้แก่ ความหนืด ความหนาแน่น ความตึงผิว เป็นต้น นอกจากนี้สมบัติทางอุณหพลศาสตร์ที่สำคัญ เช่น ความร้อน (Enthalpy) และพลังงานอิสระกิบส์ (Gibbs free energy) ในการจำลองกระบวนการโดยใช้ซิมูเลเตอร์ (Simulator) ในงานออกแบบกระบวนการ หรือในงานอื่นๆ จำเป็นต้องทราบข้อมูลเพื่อใช้ในการคำนวณ สำหรับสารเคมีที่ใช้กันมานาน การทดลองทำให้ทราบสมบัติขั้นต้นที่ได้กล่าวมา แต่สำหรับสารใหม่หรือสารที่มีความซับซ้อนในโมเลกุล จำพวกน้ำมันทั้งหลาย ถ้าไม่ทำการทดลองการจำลองกระบวนการ จำเป็นต้องพึ่งการประมาณสมบัติสาร วิธีการประมาณสมบัติสารมีหลากหลายวิธี โดยวิธีที่จะมาแนะนำ ได้แก่ วิธีของ Joback Gani และ Benson

1. Joback method (Poling, Prausnitz & O'Connell, 2001)

วิธีของ Joback นำการประมาณสมบัติของ Lydersen มาพัฒนาปรับปรุง และเพิ่มหมู่ฟังก์ชันใหม่ สามารถประมาณสมบัติของสารได้หลากหลาย ลักษณะของการประมาณสมบัติเป็นแบบการนับจำนวนของฟังก์ชันในโครงสร้างของสาร ตัวอย่างเช่น

โดยที่ k คือ ค่าของแต่ละหมู่ฟังก์ชันของแต่ละพารามิเตอร์

N_k คือ จำนวนหมู่ของหมู่ฟังก์ชัน k

ตารางที่ 2.2 ตัวอย่างค่า k ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Joback

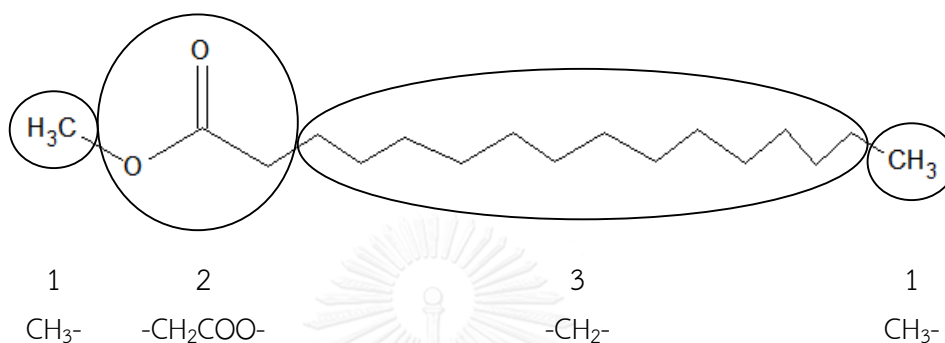
Group	k_{tb}	k_{tc}	k_{pc}	k_{vc}	k_{hf}	k_{gf}
CH ₃ -	23.58	0.0141	-0.0012	65	-76.45	-43.96
-CH ₂ -	22.88	0.0189	0.0000	56	-20.64	8.42
CH-(3)	21.74	0.0164	0.0020	41	29.89	58.36
C-(4)	18.25	0.0067	0.0043	27	82.23	116.02
CH ₂ =	18.18	0.0113	-0.0028	56	-9.63	3.77
=CH-	24.96	0.0129	-0.0006	46	37.97	48.53
=C-(2)	24.14	0.0117	0.0011	38	83.99	92.36
=C=	26.15	0.0026	0.0028	36	142.14	136.70
-O-	22.42	0.0168	0.0015	18	-132.22	-105.00
-OH	92.88	0.0741	0.0112	28	-208.04	-189.20
-COO-	81.10	0.0481	0.0005	82	-337.92	-301.95
-COOH	169.09	0.0791	0.0077	89	-426.72	-387.87

2. Gani method (Marrero & Gani, 2001: 183-208)

การประมาณสมบัติของวิธี Gani มีวิธีการนับหมู่ฟังก์ชัน และการคำนวณคล้ายกับวิธีของ Joback แต่วิธีของ Gani มีรูปแบบของหมู่ฟังก์ชันที่หลากหลายกว่า รวมถึงมีการคำนวณถึงตัวปรับลำดับที่ 3 (3rd order) โดยลำดับที่ 1 เป็นการคำนวณสมบัติของสาร แต่ลำดับที่ 2 และ 3 เป็นตัวปรับให้สมบัติที่ทำการประมาณมีความแม่นยำมากขึ้น ตัวปรับลำดับที่ 2 และ 3 มีในหมู่ฟังก์ชันที่ความซับซ้อน ซึ่งเมทิลเอสเทอร์และ TMP esters มีโครงสร้างไม่ซับซ้อนจึงไม่จำเป็นต้องใช้ตัวปรับลำดับที่ 2 และ 3 วิธีการประมาณสมบัติของ Gani มีการนับหมู่ฟังก์ชันดังตัวอย่างนี้

เมทิลปาล์มมิเตต- $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOCH}_3$ ดังภาพที่ 2.4 สามารถนับหมู่โครงสร้างได้เป็น

- | | |
|------------------------------|---------|
| 1. CH_3 - | 2 หมู่ |
| 2. $-\text{CH}_2\text{COO}-$ | 1 หมู่ |
| 3. $-\text{CH}_2-$ | 13 หมู่ |



ภาพที่ 2.4 การจำแนกและนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตต ด้วยวิธีของ Gani

เมื่อพิจารณาการนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตตวิธีการประมาณของ Gani จะมีหมู่โครงสร้างที่แตกต่างออกไปจากวิธีของ Joback ส่วนสมการที่ใช้ในการประมาณสารเป็นดังตารางที่ 2.3 และตัวอย่างของค่า X ในบางหมู่แสดงดังตารางที่ 2.4

ตารางที่ 2.3 สมการการประมาณสมบัติของวิธีของ Gani

Property	Function
T_b (K)	$T_b = 222.543 \ln X_{tb}$
T_c (K)	$T_c = 231.239 \ln X_{tc}$
P_c (bar)	$P_c = (X_{pc} + 0.108998)^{-2} + 5.9827$
V_c (cm^3/mol)	$V_c = X_{vc} + 7.95$
ΔH_f° (kJ/mol)	$\Delta H_f^\circ = X_{hf} + 5.549$
ΔG_f° (kJ/mol)	$\Delta G_f^\circ = X_{gf} - 34.867$

โดยที่ X คือ ค่าจากการคำนวณพารามิเตอร์ของแต่ละสมบัติ

$$\text{โดย } X = \sum_i N_i X_{y1i} + a \sum_j M_j X_{y2j} + b \sum_k O_k X_{y3k}$$

$X_{y1i}, X_{y2j}, X_{y3k}$ คือ ค่าของหมู่ฟังก์ชัน i, j, k ของแต่ละพารามิเตอร์ในลำดับที่ 1, 2 และ 3

N_i, M_j, O_k คือ จำนวนของหมู่ฟังก์ชัน i, j และ k

a เป็น 1 เมื่อมีตัวปรับลำดับที่ 2 / เป็น 0 เมื่อไม่มีตัวปรับลำดับที่ 2

b เป็น 1 เมื่อมีตัวปรับลำดับที่ 3 / เป็น 0 เมื่อไม่มีตัวปรับลำดับที่ 3

a และ b เป็นตัวกำหนดว่ามีตัวปรับลำดับที่ 2 และ 3 หรือไม่ โดยแบ่งได้เป็น 3 รูปแบบ คือ

a และ b เป็น 0 คือ ไม่มีตัวปรับลำดับที่ 2 และ 3 เช่น เมทิลปาล์มมิเตต

a เป็น 1 และ b เป็น 0 คือ มีการใช้ตัวปรับลำดับที่ 2 แต่ไม่ใช้ลำดับที่ 3 เช่น กรด

ซึกซินิก (Succinic acid, $\text{HOOCCH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$)

a และ b เป็น 1 คือมีการใช้ตัวปรับทั้งลำดับที่ 2 และ 3 เช่น ไบเบนซิล (Bibenzyl)

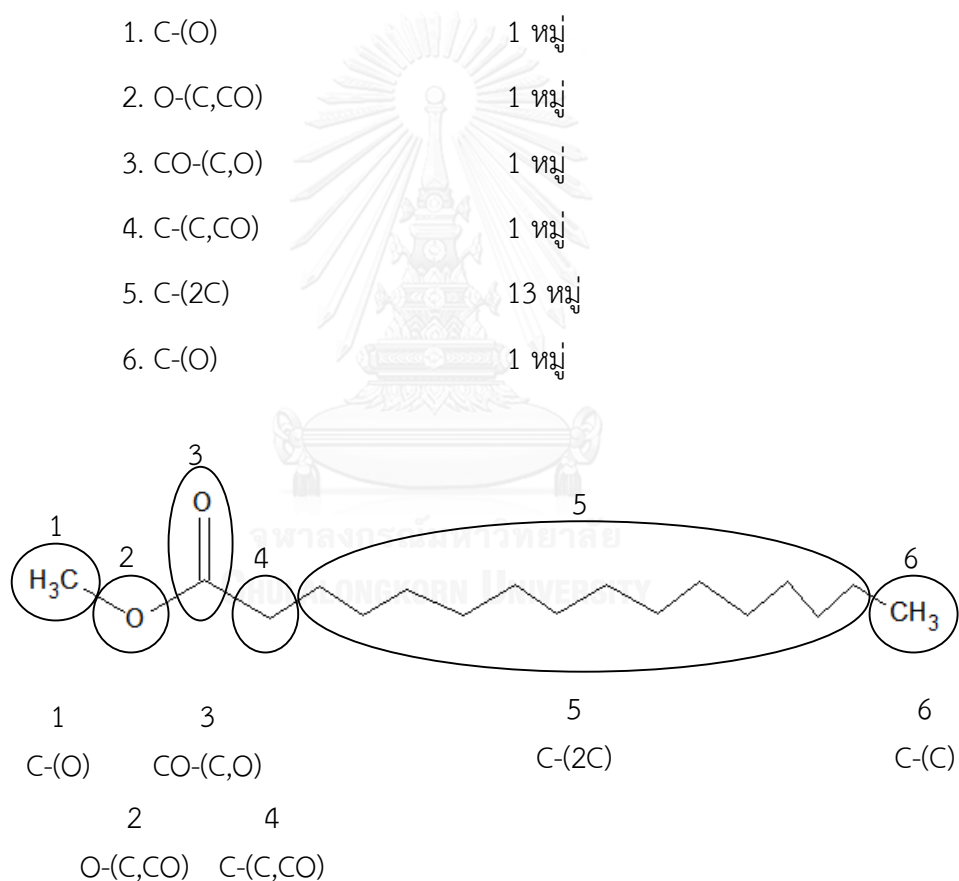
ตารางที่ 2.4 ตัวอย่างค่า X ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Gani ลำดับที่ 1

Group	X_{1tb}	X_{1tc}	X_{1pc}	X_{1vc}	X_{1hf}	X_{1gf}
CH_3-	0.8491	1.7506	0.018615	68.35	-42.479	2.878
$-\text{CH}_2-$	0.2515	1.3327	0.013547	56.28	-20.829	8.064
$\text{CH}(3)$	0.2925	0.5960	0.007259	37.50	-7.122	8.254
$\text{C}(4)$	-0.0671	0.0306	0.001219	16.01	8.928	16.413
$\text{CH}_2=\text{CH}-$	1.5596	3.2295	0.025745	111.43	57.509	95.738
$-\text{CH}=\text{CH}-$	1.5597	3.0741	0.023003	98.43	69.664	92.656
$-\text{CH}=\text{C}(2)$	1.2971	2.5666	0.019609	83.89	81.835	88.691
$\text{CH}_2=\text{C}=\text{CH}-$	2.6840	5.4330	0.035483	143.57	198.840	229.906
OH	2.5670	5.2188	-0.005401	30.61	-178.360	-144.051
$-\text{CH}_2\text{CO}-$	2.6761	5.7157	0.019619	112.79	-163.090	-120.425
$-\text{CH}_2\text{COO}-$	2.9850	6.3179	0.033812	148.91	-364.204	-298.332
$-\text{COOH}$	5.1108	14.6038	0.009885	90.66	-389.931	-337.090

3. Benson method (Poling, Prausnitz & O'Connell, 2001)

วิธีของ Benson สามารถใช้ประมาณสมบัติได้น้อยกว่าวิธีของ Joback และ Gani สมบัติที่วิธีของ Benson ประมาณได้ คือ ความร้อนในการประกอบสาร และ พลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร โดยการนับหมู่ฟังก์ชันเป็นลักษณะการนับอะตอมของคาร์บอน และจำแนกลักษณะของหมู่ฟังก์ชันตามพันธะ หรืออะตอมที่มาทำพันธะกับอะตอมคาร์บอน ตัวอย่างของการนับหมู่ฟังก์ชันของวิธีของ Benson เป็นดังนี้

เมทิลปาล์มมิเตต- $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{COOCH}_3$ ดังภาพที่ 2.5 วงเล็บด้านหลังของหมู่ฟังก์ชันข้างเป็นอะตอมที่ทำพันธะด้วย ซึ่งสามารถนับหมู่โครงสร้างได้เป็น



ภาพที่ 2.5 การจำแนกและนับหมู่โครงสร้างของเมทิลปาล์มมิเตต ด้วยวิธีของ Benson

ในการคำนวณสมบัติโดยวิธีของ Benson พลังงานอิสระกิบส์จะไม่มีค่าที่ใช้ในการคำนวณโดยตรง จะคำนวณโดยใช้ค่าจากเอนทาลปี (ความร้อน) และเอนโทรปีมาคำนวณอีกที โดยสมการที่ใช้ในการคำนวณแสดงดังตาราง 2.5 และตัวอย่างค่า k ในบางหมู่แสดงดังตาราง 2.6

ตารางที่ 2.5 สมการการประมาณสมบัติของวิธีของ Benson

Property	Function
ΔH_f° (kJ/mol)	$\Delta H_f^\circ = \sum_k N_k k_{hf}$
ΔG_f° (kJ/mol)	$\Delta G_f^\circ = \Delta H_f^\circ - 298.15(S^\circ - S_{el}^\circ)$
S° (kJ/mol.K)	$S^\circ = \sum_k N_k k_s + S_s^\circ$

โดยที่ k คือ ค่าของแต่ละหมู่ฟังก์ชันของแต่ละพารามิเตอร์
 N_k คือ จำนวนหมู่ของหมู่ฟังก์ชัน k

ตารางที่ 2.6 ตัวอย่างค่า k ของแต่ละหมู่ฟังก์ชันในแต่ละพารามิเตอร์ ของวิธีของ Benson

Group	k_{hf}	k_s
C(C)	-42.19	127.29
C(2C)	-20.64	39.43
C(3C)	-7.95	-50.52
C(4C)	2.09	-146.92
C(C,O)	-33.91	41.02
C(C,CO)	-21.77	40.18
C(2C,CO)	-7.12	-50.23
O(2C)	-97.11	36.33
O(2O)	79.53	39.35
O(C,CO)	-180.41	35.12
O(C,O)	-18.84	39.54
OH(C)	-158.56	121.68

บทที่ 3 สารที่เกี่ยวข้องและวิธีการดำเนินการ

3.1 สารที่เกี่ยวข้อง

สารตั้งต้นที่ใช้ในการจำลองกระบวนการ คือ ไตรเมทิลอลโพรเพน (Trimethylolpropane, TMP) และสารตั้งต้นจำพวกกรดไขมัน แบ่งออกเป็น 2 กลุ่มใหญ่ๆ ด้วยกัน คือ

3.1.1 กลุ่มเมทิลเอสเทอร์ (Palm oil methyl esters, POME) สำหรับการจำลองปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริเฟเคชัน ได้แก่ เมทิลลอเรต (Methyl laurate), เมทิลไมริสเตต (Methyl myristate), เมทิลปาล์มมิเตต (Methyl palmitate) เมทิลสเตียเรต (Methyl stearate), เมทิลโอเลอเตต (Methyl oleate) และเมทิลไลโนเลอเตต (Methyl linoleate)

3.1.2 กลุ่มกรดไขมันคาร์บอกซิลิก (Palm oil fatty acids, POFA) สำหรับการจำลองปฏิกิริยาเอสเทอร์ริเฟเคชัน ได้แก่ กรดลอริก (Lauric acid), กรดไมริสติก (Myristic acid), กรดปาล์มมิติก (Palmitic acid) กรดสเตียริก (Stearic acid), กรดโอเลอิก (Oleic acid) และ กรดไลโนเลอิก (Linoleic acid)

สัดส่วนของกรดไขมันที่สำคัญนำมาใช้ในการจำลอง นำมาจากงานวิจัยของ Yunus และคณะ (2003) โดยมีสัดส่วนดังตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 แสดงสัดส่วนของกรดไขมันโดยน้ำหนัก (Yunus และคณะ, 2003)

กรดไขมัน	ร้อยละโดยน้ำหนัก
เมทิลลอเรต/กรดลอริก	0.9
เมทิลไมริสเตต/กรดไมริสติก	1.5
เมทิลปาล์มมิเตต/กรดปาล์มมิติก/	41.5
เมทิลสเตียเรต/กรดสเตียริก	2.7
เมทิลโอเลอเตต/กรดโอเลอิก	40.6
เมทิลไลโนเลอเตต/กรดไลโนเลอิก	11.9

ผลิตภัณฑ์ ได้แก่ น้ำ เมทานอล และ TMP esters 83 สาร เกิดจากการจับคู่ของ TMP และ กรดไขมันทั้ง 6 ชนิด โดยแบ่งเป็น โมโนเอสเทอร์ (Mono-esters) 6 สาร, ไดเอสเทอร์ (Di-esters) 21 สาร และ ไตรเอสเทอร์ (Tri-esters) 56 สาร ซึ่งต้องทำการจำลองสารเหล่านี้ รายละเอียดอยู่ในหัวข้อ ถัดไป

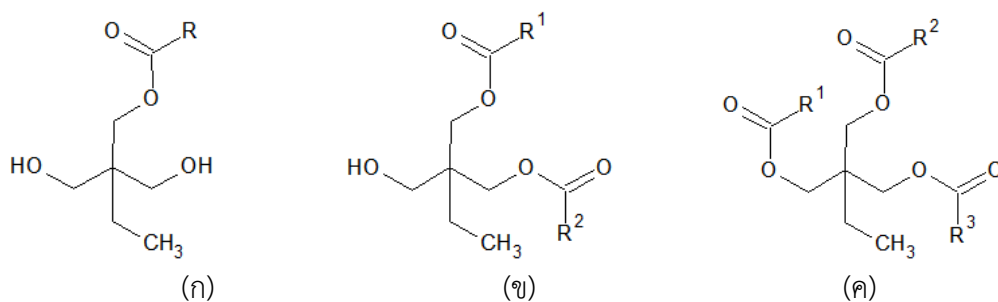
3.2 ซอฟต์แวร์ที่เกี่ยวข้อง

ซอฟต์แวร์ที่เกี่ยวข้องในการจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ประกอบด้วยซอฟต์แวร์ สำคัญ 2 ซอฟต์แวร์ด้วยกัน

- 3.2.1 ASPEN Plus ใช้ในการจำลองกระบวนการ รวมทั้งจำลอง และประมาณสมบัติ ของสาร
- 3.2.2 ChemSketch ใช้ในการวาดโครงสร้างของสารที่ใช้ในการจำลอง

3.3 การประมาณสมบัติสาร

ข้อมูลของ TMP esters ไม่มีอยู่ในฐานข้อมูลของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus จึงต้องทำการ จำลองสารขึ้น การจำลองสารปฏิบัติโดยการป้อนข้อมูลโครงสร้างของสารลงในซอฟต์แวร์ ASPEN Plus นอกจากนี้เพื่อให้สมบัติของสารประกอบอื่น เช่น กรดไขมัน และเมทิลเอสเทอร์ มีสมบัติใน ทิศทางเดียวกันกับ TMP esters จึงประมาณสารเหล่านี้ด้วย TMP esters จำแนกออกเป็น 3 ลักษณะ ด้วยกัน คือ โมโนเอสเทอร์ (Mono-esters) 6 สาร, ไดเอสเทอร์ (Di-esters) 21 สาร และ ไตรเอส เทอร์ (Tri-esters) 56 สาร โครงสร้างของสารทั้ง 3 ลักษณะเป็นดังภาพที่ 3.1 รายการของสารทั้ง 83 สาร แสดงดังตารางที่ 3.2



ภาพที่ 3.1 โครงสร้างโมเลกุล (ก) Mono-esters (ข) Di-esters (ค) Tri-esters

แต่ก่อนที่จะไปประมาณสารที่จำเป็นต่อการจำลองการสังเคราะห์เหล่านั้น จำเป็นต้องเลือกวิธีการประมาณที่เหมาะสม ที่สามารถประมาณสมบัติของสารได้ใกล้เคียงกับสมบัติของสารจริงๆ จึงทำการทดสอบวิธีการประมาณสมบัติของสารต่าง โดยแบ่งออกเป็น 2 ส่วน ดังนี้

3.3.1 การประมาณ จุดเดือด (Normal boiling point) อุณหภูมิวิกฤติ (Critical temperature) ความดันวิกฤติ (Critical pressure) และปริมาตรวิกฤติ (critical volume) เป็นสมบัติของสารโดยทั่วไป ทดสอบด้วยการประมาณกรดไขมัน และเมทิลเอสเทอร์ วิธีที่ใช้ในการประมาณสมบัติของสารเหล่านี้ ได้แก่ Joback method (Poling, Prausnitz & O'Connell, 2001: 3.14-3.46) และ Gani method (Marrero & Gani, 2001: 183-208)

3.3.2 การประมาณ ความร้อนในการประกอบสาร (Enthalpy of formation) และพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร (Gibbs free energy of formation) เป็นสมบัติหลักที่เกี่ยวข้องกับการจำลองปฏิกิริยาด้วยสมดุลเคมี ทดสอบด้วยการประมาณกรดไขมัน เมทิลเอสเทอร์ และสารต่างๆ เล็กน้อย มีด้วยกัน 3 วิธี ได้แก่ Joback method, Gani method และ Benson method (Poling, Prausnitz & O'Connell, 2001: 3.14-3.46)

การประมาณจะเลือกวิธีใดวิธีหนึ่งที่เหมาะสม โดยการจำลองสารที่มีข้อมูลอยู่แล้ว เปรียบเทียบกับข้อมูลที่มีอยู่เพื่อเลือกวิธีที่สมบัติใกล้เคียงกับข้อมูลที่มีอยู่ การป้อนรายละเอียดข้อมูลของสารเพื่อทำการประมาณสมบัติของสารนั้น ซอฟต์แวร์ ASPEN Plus อำนาจความสะดวกให้กับผู้ใช้โดยสามารถนำเข้าโครงสร้างของสารเข้าไปในซอฟต์แวร์ และสั่งให้ซอฟต์แวร์ทำการนับ จำแนก และคำนวณหมู่ฟังก์ชันกับพันธะเคมีได้ โครงสร้างของสารที่นำเข้าไปในซอฟต์แวร์นั้นจำเป็นต้องวาดขึ้นมาใหม่ บันทึกนามสกุลของไฟล์ในรูปแบบ mol โดยซอฟต์แวร์ที่ใช้ในการวาดโครงสร้างของสารคือ ChemSketch เมื่อนำเข้าโครงสร้างของสารเข้าไปในซอฟต์แวร์ ASPEN Plus และสั่งให้ซอฟต์แวร์ทำการจำแนกลักษณะของโครงสร้างแล้วจึงทำการกำหนดวิธีการประมาณสมบัติของสารต่อไป เมื่อซอฟต์แวร์คำนวณสมบัติของสารจากวิธีการประมาณสมบัติแล้ว ขึ้นต่อไปเป็นการนำสมบัติที่ประมาณมาเปรียบเทียบ วิธีการคือนำสมบัติที่ได้มาเปรียบเทียบกับข้อมูลที่อยู่ใน หนังสือของ Perry (Green, Perry, 2008) และ/หรือ ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus โดยคำนวณความคลาดเคลื่อน

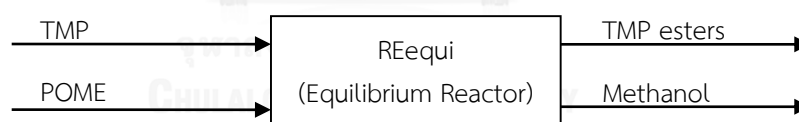
เป็นเปอร์เซ็นต์ ต่อจากนั้นนำความคลาดเคลื่อนของแต่ละวิธีทั้งหมดมาหาค่าเฉลี่ยจากน้ำหนักโมเลกุลของสารแล้วทำการเลือกวิธีที่มีความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยน้อยที่สุดต่อไป

3.4 การจำลองการสังเคราะห์

จากที่ได้กล่าวไปแล้วการจำลองการสังเคราะห์จำเป็นต้องจำลองสารที่ใช้ในปฏิกิริยาขึ้นมาในขั้นตอนนี้จึงแบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอน ดังนี้

3.4.1 การจำลองและประมาณสมบัติสาร ขั้นตอนนี้เป็นการจำลองสารที่เกี่ยวข้องกับการสังเคราะห์ TMP esters ได้แก่ TMP เมทิลเอสเทอร์ กรดไขมัน และ TMP esters โดย TMP ester แบ่งเป็น Mono-esters 6 สาร Di-esters 21 สาร และ Tri-esters 56 สาร ตามตารางที่ 3.2 ซึ่งสารทั้ง 3 ชนิดเรียงตามลำดับ

3.4.2 การจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ขั้นตอนนี้ปฏิบัติหลังการประมาณสมบัติของสารที่จำลองขึ้นมาเสร็จแล้ว ใช้เครื่องมือ REequi (Equilibrium reactor) ของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus เป็นเครื่องมือสำหรับการจำลองเตาปฏิกรณ์ในการจำลองกระบวนการ ผลลัพธ์ของเครื่องมือ REequi เป็นการคำนวณโดยใช้หลักของสมดุลเคมี แผนผังการจำลองการสังเคราะห์แสดงดังภาพที่ 3.2 การคำนวณทางอุณหพลศาสตร์ใช้โมเดล NRTL



ภาพที่ 3.2 แผนผังการจำลองการสังเคราะห์ TMP ester ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน

สารขาเข้ากำหนด โดยใช้อัตราส่วนของ TMP : POME เป็น 1:3.9 โดยโมล การจำลองกระบวนการแบ่งการศึกษาออกเป็น 2 ลักษณะด้วยกัน ดังนี้

- ก. ความดันคงที่ที่ 10 มิลลิบาร์ ปรับเปลี่ยนอุณหภูมิเป็น 80 100 120 130 และ 140 องศาเซลเซียส
- ข. อุณหภูมิคงที่ที่ 130 องศาเซลเซียส ปรับเปลี่ยนความดันเป็น 0.1 10 50 100 และ 500 มิลลิบาร์

ข้อมูลของปฏิกิริยาที่ป้อนเข้าไปในเครื่องมือ REequi เป็นปฏิกิริยาแบบลูกโซ่ (Chain reaction) ซึ่งปฏิกิริยาทรานเอสเทอร์ฟิเคชันของแต่ละสารแสดงดังตารางที่ 3.2 โดยคอลัมน์ของปฏิกิริยาในตารางแสดงปฏิกิริยาที่ทำให้เกิดสารในคอลัมน์สาร บางสารสามารถเกิดได้จากหลายปฏิกิริยา เช่น RMP เป็น Tri-esters สามารถเกิดได้จาก 3 ปฏิกิริยาดังกล่าว จึงป้อนข้อมูลปฏิกิริยาเข้าไปในซอฟต์แวร์ทั้ง 3 ปฏิกิริยา โดยปฏิกิริยาทั้งหมดรวม 168 ปฏิกิริยา สำหรับปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันให้ทำการเปลี่ยนสารตั้งต้นจาก POME เป็น POFA แทน และผลิตภัณฑ์จากเมทานอลเป็นน้ำ



ตารางที่ 3.2 TMP esters และปฏิกิริยาการเกิด TMP esters

โดยที่ R = Methyl laurate M = Methy myristate
 P = Methyl palmitate S = Methyl stearate
 O = Methyl oleate L = Methyl linoleate
 N = None W = Methanol

ที่	สาร	ปฏิกิริยา		
1	RNN	$TMP + R = RNN + W$		
2	MNN	$TMP + M = MNN + W$		
3	PNN	$TMP + P = PNN + W$		
4	SNN	$TMP + S = SNN + W$		
5	ONN	$TMP + O = ONN + W$		
6	LNN	$TMP + L = LNN + W$		
7	RRN	$RNN + R = RRN + W$		
8	RMN	$RNN + M = RMN + W$	$MNN + R = RMN + W$	
9	RPN	$RNN + P = RPN + W$	$PNN + R = RPN + W$	
10	RSN	$RNN + S = RSN + W$	$SNN + R = RSN + W$	
11	RON	$RNN + O = RON + W$	$ONN + R = RON + W$	
12	RLN	$RNN + L = RLN + W$	$LNN + R = RLN + W$	
13	MMN	$MNN + M = MMN + W$		
14	MPN	$MNN + P = MPN + W$	$PNN + M = MPN + W$	
15	MSN	$MNN + S = MSN + W$	$SNN + M = MSN + W$	
16	MON	$MNN + O = MON + W$	$ONN + M = MON + W$	
17	MLN	$MNN + L = MLN + W$	$LNN + M = MLN + W$	
18	PPN	$PNN + P = PPN + W$		
19	PSN	$PNN + S = PSN + W$	$SNN + P = PSN + W$	
20	PON	$PNN + O = PON + W$	$ONN + P = PON + W$	
21	PLN	$PNN + L = PLN + W$	$LNN + P = PLN + W$	

ตารางที่ 3.2 TMP esters และปฏิกิริยาการเกิด TMP esters (ต่อ)

ที่	สาร	ปฏิกิริยา		
22	SSN	$SNN + S = SSN + W$		
23	SON	$SNN + O = SON + W$	$ONN + S = SON + W$	
24	SLN	$SNN + L = SLN + W$	$LNN + S = SLN + W$	
25	OON	$ONN + O = OON + W$		
26	OLN	$ONN + L = OLN + W$	$LNN + O = OLN + W$	
27	LLN	$LNN + L = LLN + W$		
28	RRR	$RRN + R = RRR + W$		
29	RRM	$RRN + M = RRM + W$	$RMN + R = RRM + W$	
30	RRP	$RRN + P = RRP + W$	$RPN + R = RRP + W$	
31	RRS	$RRN + S = RRS + W$	$RSN + R = RRS + W$	
32	RRO	$RRN + O = RRO + W$	$RON + R = RRO + W$	
33	RRL	$RRN + L = RRL + W$	$RLN + R = RRL + W$	
34	MMM	$MMN + M = MMM + W$		
35	MMP	$MMN + P = MMP + W$	$MPN + M = MMP + W$	
36	MMS	$MMN + S = MMS + W$	$MSN + M = MMS + W$	
37	MMO	$MMN + O = MMO + W$	$MON + M = MMO + W$	
38	MML	$MMN + L = MML + W$	$MLN + M = MML + W$	
39	PPP	$PPN + P = PPP + W$		
40	PPS	$PPN + S = PPS + W$	$PSN + P = PPS + W$	
41	PPO	$PPN + O = PPO + W$	$PON + P = PPO + W$	
42	PPL	$PPN + L = PPL + W$	$PLN + P = PPL + W$	
43	SSS	$SSN + W = SSS + W$		
44	SSO	$SSN + O = SSO + W$	$SON + S = SSO + W$	
45	SSL	$SSN + L = SSL + W$	$SLN + S = SSL + W$	

ตารางที่ 3.2 TMP esters และปฏิกิริยาการเกิด TMP esters (ต่อ)

ที่	สาร	ปฏิกิริยา		
46	OOO	$OON + O = OOO + W$		
47	OOL	$OON + L = OOL + W$	$OLN + O = OOL + W$	
48	LLL	$LLN + L = LLL + W$		
49	RMM	$RMN + M = RMM + W$	$MMN + R = RMM + W$	
50	RMP	$RMN + P = RMP + W$	$RPN + M = RMP + W$	$MPN + R = RMP + W$
51	RMS	$RMN + S = RMS + W$	$RSN + M = RMS + W$	$MSN + R = RMS + W$
52	RMO	$RMN + O = RMO + W$	$RON + M = RMO + W$	$MON + R = RMO + W$
53	RML	$RMN + L = RML + W$	$RLN + M = RML + W$	$MLN + R = RML + W$
54	RPP	$RPN + P = RPP + W$	$PPN + R = RPP + W$	
55	RPS	$RPN + S = RPS + W$	$RSN + P = RPS + W$	$PSN + R = RPS + W$
56	RPO	$RPN + O = RPO + W$	$RON + P = RPO + W$	$PON + R = RPO + W$
57	RPL	$RPN + L = RPL + W$	$RLN + P = RPL + W$	$PLN + R = RPL + W$
58	RSS	$RSN + S = RSS + W$	$SSN + R = RSS + W$	
59	RSO	$RSN + O = RSO + W$	$RON + S = RSO + W$	$SON + R = RSO + W$
60	RSL	$RSN + L = RSL + W$	$RLN + S = RSL + W$	$SLN + R = RSL + W$
61	ROO	$RON + O = ROO + W$	$OON + R = ROO + W$	
62	ROL	$RON + L = ROL + W$	$RLN + O = ROL + W$	$OLN + R = ROL + W$
63	RLL	$RLN + L = RLL + W$	$LLN + R = RLL + W$	
64	MPP	$MPN + P = MPP + W$	$PPN + M = MPP + W$	
65	MPS	$MPN + S = MPS + W$	$MSN + P = MPS + W$	$PSN + M = MPS + W$
66	MPO	$MPN + O = MPO + W$	$MON + P = MPO + W$	$PON + M = MPO + W$
67	MPL	$MPN + L = MPL + W$	$MLN + P = MPL + W$	$PLN + M = MPL + W$
68	MSS	$MSN + S = MSS + W$	$SSN + M = MSS + W$	
69	MSO	$MSN + O = MSO + W$	$MON + S = MSO + W$	$SON + M = MSO + W$

ตารางที่ 3.2 TMP esters และปฏิกิริยาการเกิด TMP esters (ต่อ)

ที่	สาร	ปฏิกิริยา		
70	MSL	$MSN + L = MSL + W$	$MLN + S = MSL + W$	$SLN + M = MSL + W$
71	MOO	$MON + O = MOO + W$	$OON + M = MOO + W$	
72	MOL	$MON + L = MOL + W$	$MLN + O = MOL + W$	$OLN + M = MOL + W$
73	MLL	$MLN + L = MLL + W$	$LLN + M = MLL + W$	
74	PSS	$PSN + S = PSS + W$	$SSN + P = PSS + W$	
75	PSO	$PSN + O = PSO + W$	$PON + S = PSO + W$	$SON + P = PSO + W$
76	PSL	$PSN + L = PSL + W$	$PLN + S = PSL + W$	$SLN + P = PSL + W$
77	POO	$PON + O = POO + W$	$OON + P = POO + W$	
78	POL	$PON + L = POL + W$	$PLN + O = POL + W$	$OLN + P = POL + W$
79	PLL	$PLN + L = PLL + W$	$LLN + P = PLL + W$	
80	SOO	$SON + O = SOO + W$	$OON + S = SOO + W$	
81	SOL	$SON + L = SOL + W$	$SLN + O = SOL + W$	$OLN + S = SOL + W$
82	SLL	$SLN + L = SLL + W$	$LLN + S = SLL + W$	
83	OLL	$OLN + L = OLL + W$	$LLN + O = OLL + W$	

บทที่ 4 การประมาณสมบัติสาร

การประมาณสมบัติสารทำได้โดยการวาดโครงสร้างของสาร และนำโครงสร้างของสารที่เราต้องการจำลองป้อนเข้าไปในซอฟต์แวร์ ASPEN Plus การประมาณสมบัติของสารให้ใกล้เคียงกับความเป็นจริงเป็นสิ่งสำคัญในการนำสารไปจำลองกระบวนการสังเคราะห์ต่อไป การประมาณสมบัติสารแบ่งออกเป็น 2 ส่วนด้วยกัน ส่วนแรกเป็นการประมาณสมบัติทั่วไปของสาร ได้แก่ จุดเดือด (Boiling point temperature) และจุดวิกฤติต่างๆ (Critical properties) ส่วนที่สองเป็นการประมาณสมบัติเกี่ยวกับการประกอบสาร ได้แก่ พลังงานอิสระกิบส์ (Gibbs free energy of formation) และ เอนทาลปี (Enthalpy of formation) โดยแยกการพิจารณาวิธีการประมาณ เนื่องจากมีวิธีการประมาณที่เหมาะสมในการพิจารณาแตกต่างกัน

4.1 สมบัติทั่วไปของสาร

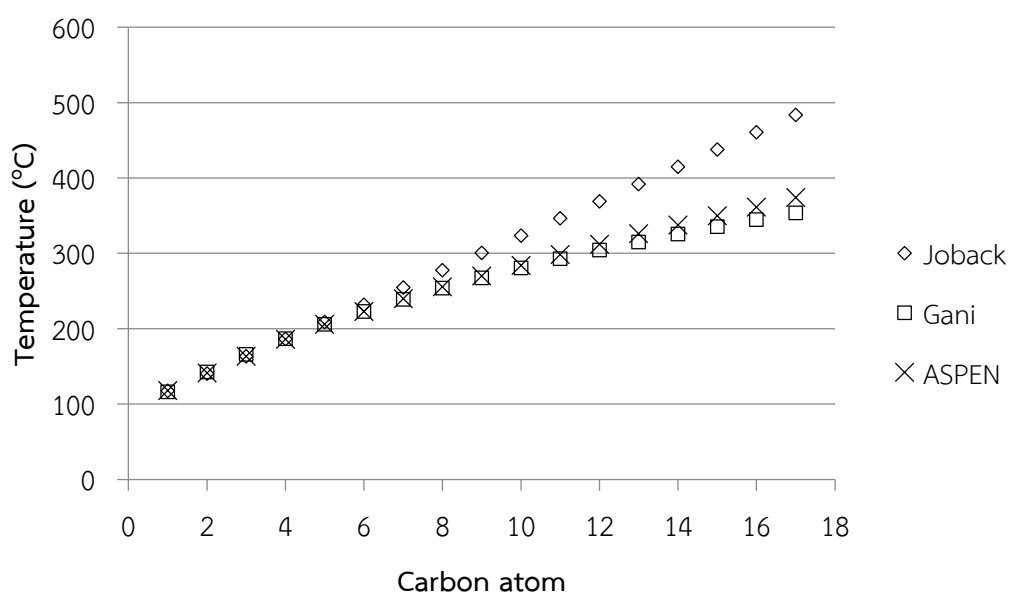
จุดเดือด อุณหภูมิวิกฤติ ความดันวิกฤติ และปริมาตรวิกฤติ เป็นสมบัติพื้นฐานของสารทั่วไป ซึ่งนำไปใช้ในการคำนวณหรือประมาณค่าอื่นๆ ที่เกี่ยวข้องและแปรผันไปตามอุณหภูมิ จึงนำมาพิจารณาเลือกวิธีการประมาณ ให้สามารถจำลองกระบวนการได้ข้อมูลที่เหมาะสม ในการพิจารณาได้เลือกวิธีการประมาณ 2 วิธี ได้แก่ วิธีของ Joback และ Gani มาพิจารณา เนื่องจาก 2 วิธีนี้สามารถประมาณสมบัติได้หลากหลาย โดยทั้งวิธีของ Joback และ Gani มีวิธีการประมาณสมบัติของสารคล้ายกัน คือ ประมาณจากการนับหมู่ฟังก์ชันของสาร แต่วิธีของ Gani มีรูปแบบของหมู่ฟังก์ชันหลากหลายกว่า

การทดสอบประมาณกรดไขมัน

การทดสอบประมาณกรดไขมันเป็นการนำกรดไขมันตั้งแต่ C2 ถึง C18 ที่มีข้อมูลบันทึกจากหนังสือ Perry และข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus มาเปรียบเทียบกับสารที่ได้จำลองขึ้น และประมาณด้วยวิธีของ Joback และ Gani โดยข้อมูลของหนังสือ Perry บันทึกสมบัติของกรดไขมันที่ใช้เพียง C2 ถึง C10 ในขณะที่ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ถูกบันทึกสมบัติของกรดไขมันตั้งแต่ C2 ถึง C18 เนื่องจากในข้อมูลส่วนนี้ข้อมูลในหนังสือของ Perry เหมือนกับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus และข้อมูลของ ASPEN Plus มีมากกว่าจึงอ้างอิงจากข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ในการทดสอบ

การเปรียบเทียบจุดเดือด

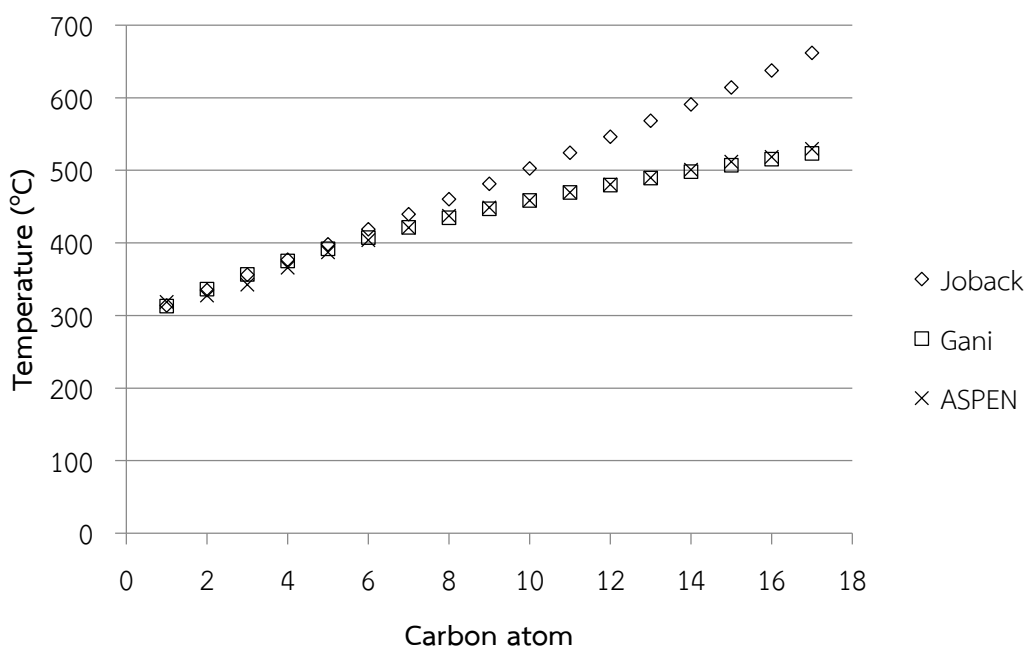
ผลการจำลองและข้อมูลต่างๆ ของจุดเดือดแสดงดังภาพที่ 4.1 จะเห็นว่าวิธีของ Gani สามารถประมาณได้ใกล้เคียงกับข้อมูลของหนังสือ Perry และซอฟต์แวร์ ASPEN Plus มากกว่าวิธีของ Joback โดยวิธีของ Gani มีจุดเดือดของ C18 ซึ่งมีความแตกต่างจากข้อมูลของ ASPEN Plus มากที่สุด คลาดเคลื่อนจากข้อมูลของ ASPEN Plus ไป -5.4 เปอร์เซ็นต์ ส่วนวิธีของ Joback คลาดเคลื่อนถึง 29.3 เปอร์เซ็นต์



ภาพที่ 4.1 การเปรียบเทียบการประมาณจุดเดือดของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบอุณหภูมิวิกฤติ

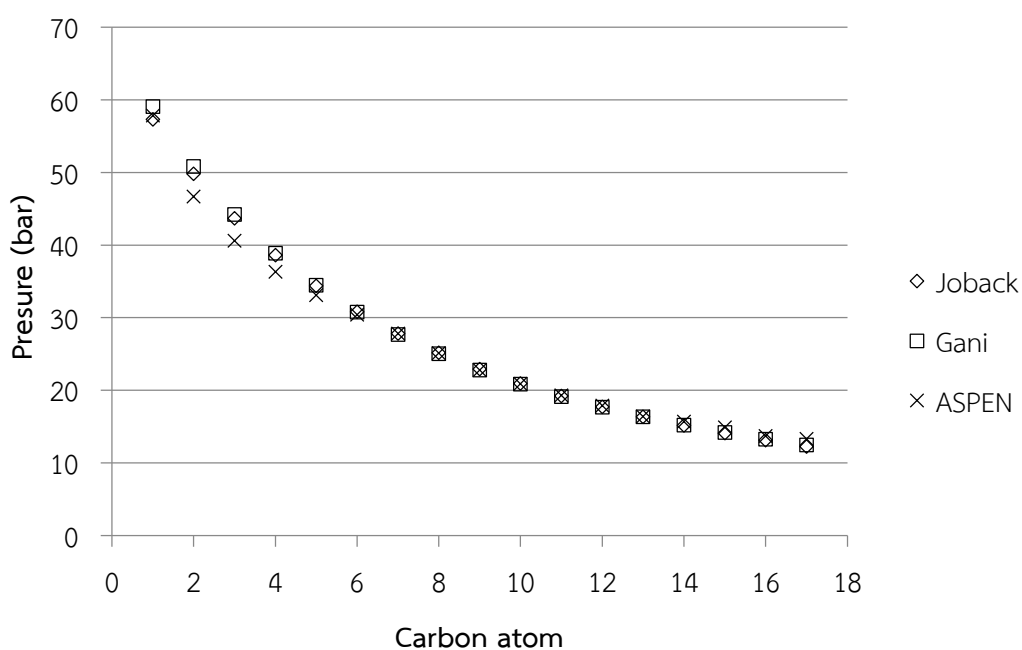
การประมาณอุณหภูมิวิกฤติด้วยวิธีของ Gani ยังคงให้ผลใกล้เคียงกับข้อมูลของหนังสือ Perry และ ซอฟต์แวร์ ASPEN Plus มากกว่า วิธีการประมาณของ Joback และยิ่งเมื่อจำนวนของอะตอมคาร์บอนสูงขึ้นวิธีของ Joback จะประมาณคลาดเคลื่อนเพิ่มขึ้นมากดังภาพที่ 4.2 โดยวิธีของ Joback คลาดเคลื่อนมากที่สุดในกรดไขมันที่จำลองขึ้นถึง 24.9 เพอร์เซ็นต์ วิธีของ Gani ประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดบิวทีริก (C4) ได้คลาดเคลื่อนมากที่สุด 4.0 เพอร์เซ็นต์ และประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดสเตียริก (C18) คลาดเคลื่อน -1.2 เพอร์เซ็นต์



ภาพที่ 4.2 การเปรียบเทียบการประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบความดันวิกฤติ

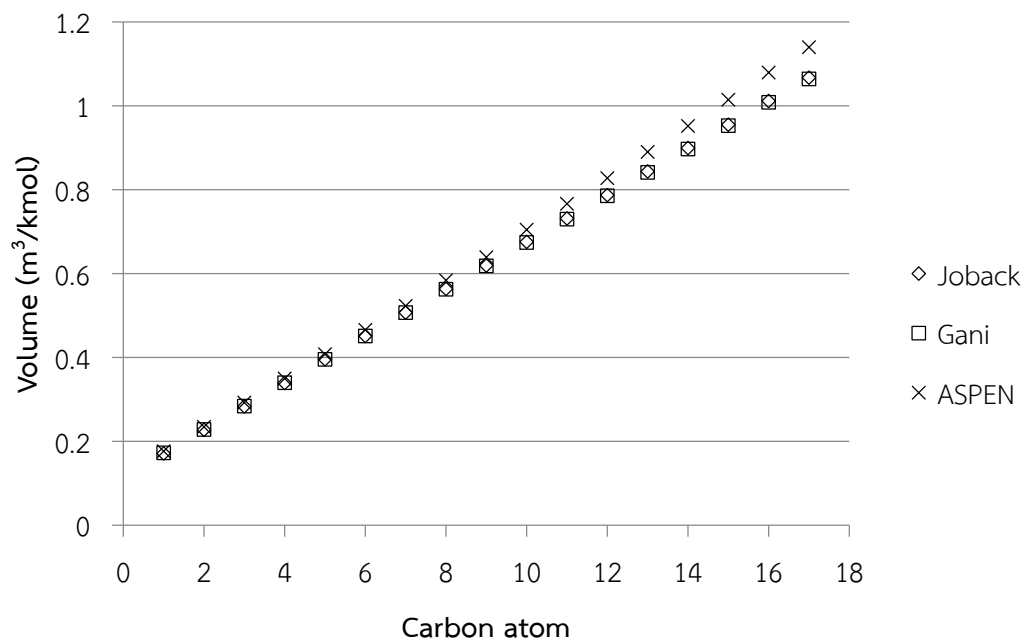
จากภาพที่ 4.3 พบว่า วิธีการประมาณความดันวิกฤติของ Joback และ Gani สามารถประมาณความดันวิกฤติได้ใกล้เคียงกับข้อมูลอ้างอิงตามหนังสือของ Perry และ ซอฟต์แวร์ ASPEN Plus มีเพียงช่วงคาร์บอนอะตอม 3 – 7 ที่การประมาณคลาดเคลื่อนเล็กน้อย โดยทั้งวิธีการประมาณความดันวิกฤติของ Joback และ Gani คลาดเคลื่อนมากที่สุดที่กรดบิวทีริก (C4) เป็น 7.6 และ 8.9 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ



ภาพที่ 4.3 การเปรียบเทียบการประมาณความดันวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบปริมาตรวิกฤติ

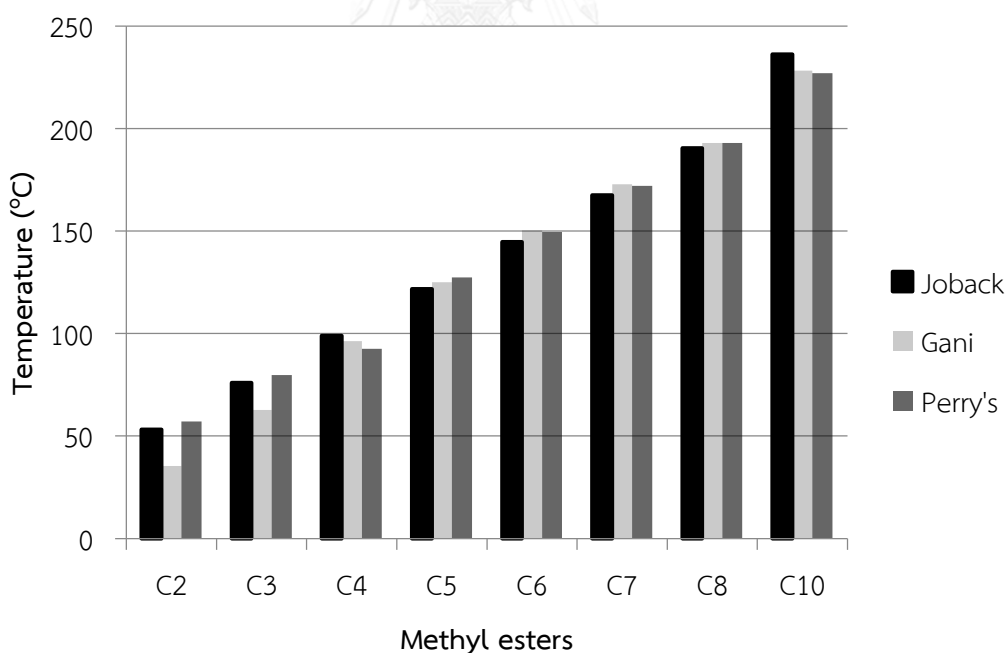
การประมาณปริมาตรวิกฤติด้วยวิธีของ Joback และ Gani ทั้งสองประมาณค่าปริมาตรวิกฤติได้ใกล้เคียงกัน จากภาพที่ 4.4 พบว่าความคลาดเคลื่อนของการประมาณทั้งสองวิธีเพิ่มขึ้นเมื่อปริมาณของอะตอมคาร์บอนเพิ่มขึ้น ซึ่งการประมาณปริมาตรวิกฤติของ Joback และ Gani คลาดเคลื่อนมากที่สุดเป็น -6.4 และ -6.6 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ



ภาพที่ 4.4 การเปรียบเทียบการประมาณปริมาตรวิกฤติของกรดไขมันของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การทดสอบประมาณเมทิลเอสเทอร์

สมบัติของสารที่สืบค้นในหนังสือ Perry เกี่ยวกับสารเมทิลเอสเทอร์ที่มีลักษณะสายตรงมีค่าน้อย ข้อมูลของจุดเดือดมีเพียงข้อมูล C2 – C8 และ C10 (นับเฉพาะจำนวนของอะตอมคาร์บอนฝั่งกรดไขมัน เช่น เมทิลบิวทีเรต $C_3H_7COOCH_3$ นับเป็น C4) และสมบัติวิกฤติทั้งสาม (อุณหภูมิ ความดัน และปริมาตร) มีเพียง C2 – C4 เท่านั้น ส่วนข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus มีข้อมูล C2 – C4, C10, C12, C14, C16 และ C18 จึงทำการเปรียบเทียบข้อมูลกับการจำลองเพียงจุดเดือดของสาร และเปรียบเทียบการประมาณสารกับข้อมูลของหนังสือ Perry เนื่องจากมีข้อมูลที่ต่อเนื่องมากกว่า โดยการเปรียบเทียบผลของการประมาณสารที่จำลองขึ้นกับข้อมูลได้สืบค้นจาก Perry แสดงดังภาพที่ 4.5 ในช่วงแรกของกราฟจำนวนของอะตอมคาร์บอนน้อยการประมาณจุดเดือดด้วยวิธีของ Gani คลาดเคลื่อนมาก (คลาดเคลื่อนถึง 38.0 เปอร์เซ็นต์) เมื่อเทียบกับการประมาณด้วยวิธีของ Joback และคลาดเคลื่อนน้อยลงเมื่อจำนวนอะตอมของคาร์บอนมากขึ้น ที่ C10 วิธีการประมาณจุดเดือดของ Joback และ Gani มีความคลาดเคลื่อน 4.0 และ -0.6 เปอร์เซ็นต์ตามลำดับ



ภาพที่ 4.5 การเปรียบเทียบการประมาณจุดเดือดของเมทิลเอสเทอร์ของวิธีการประมาณของ Joback และ Gani กับข้อมูลของหนังสือ Perry

จากการทดสอบเปรียบเทียบสมบัติต่างๆ ของกรดไขมันและเมทิลเอสเทอร์การคัดเลือกวิธีการประมาณสมบัติของสารปฏิบัติโดยการเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกับน้ำหนักของโมเลกุล ดัง

$$\text{สมการ \%Error} = \frac{\sqrt{\sum_i (M_{wi} (\%E)_i)^2}}{\sum_i M_{wi}}$$

โดย M_{wi} คือ น้ำหนักโมเลกุลของสาร i และ $(\%E)_i$ คือค่า

ความคลาดเคลื่อนของสาร i โดยผลของความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยแสดงดังตารางที่ 4.1 พบว่าวิธีการประมาณสมบัติของ Gani มีความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยน้อยกว่าวิธีการประมาณของ Joback ดังนั้นวิธีการประมาณที่เหมาะสมกับการประมาณสมบัติทั่วไป ได้แก่ จุดเดือด และจุดวิกฤติต่างๆ คือวิธีการประมาณของ Gani

ตารางที่ 4.1 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยในการประมาณสมบัติทั่วไปของการประมาณด้วยวิธี Joback และ Gani เมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลของหนังสือ Perry และ ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

	Joback	Gani
Boiling point	4.10	1.10
Critical temperature	4.42	0.25
Critical pressure	1.11	0.98
Critical volume	1.35	1.40
เฉลี่ย	2.74	0.93

4.2 สมบัติที่เกี่ยวข้องกับการประกอบสาร

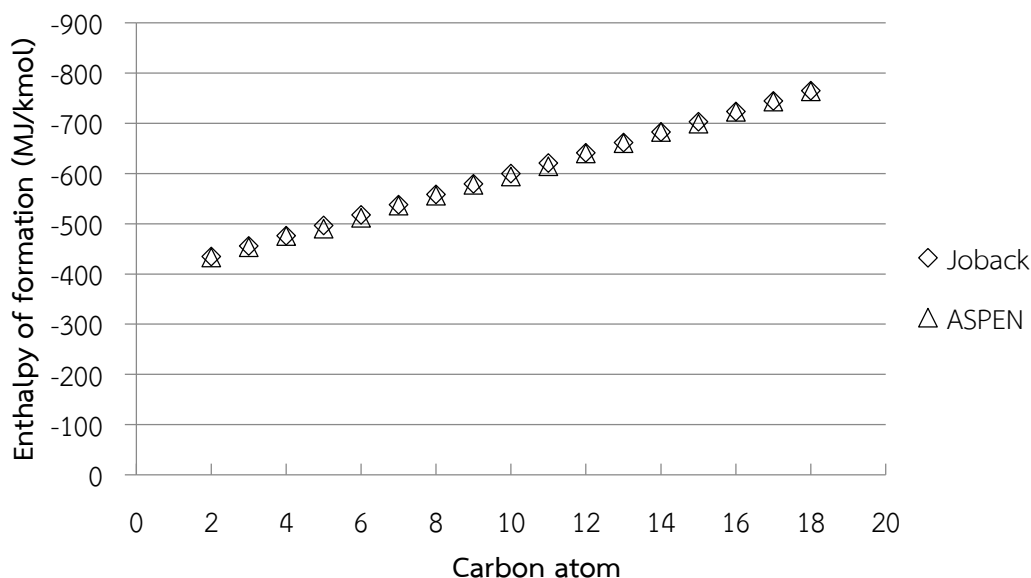
พลังงานอิสระกิบส์ (Gibbs free energy of formation) และ เอนทาลปี (Enthalpy of formation) ค่าเหล่านี้มีความจำเป็นในการคำนวณเรื่องสมดุลเคมี การประมาณสมบัติของการประกอบสารได้คัดเลือกวิธีนำมาเปรียบเทียบ 3 วิธีด้วยกัน ได้แก่ วิธีการประมาณของ Joback Gani และเพิ่มวิธีการประมาณจากการประมาณสมบัติทั่วไปอีก 1 วิธี คือ วิธี Benson โดยวิธีการประมาณของ Benson เป็นการนับจำนวนของอะตอม แยกลักษณะตามพันธะตามอะตอมนั้นๆ ซึ่งมีรูปแบบหลากหลาย และมีความแม่นยำในการประมาณสมบัติที่เกี่ยวข้องกับการประกอบสารวิธีหนึ่ง

การทดสอบประมาณกรดไขมัน

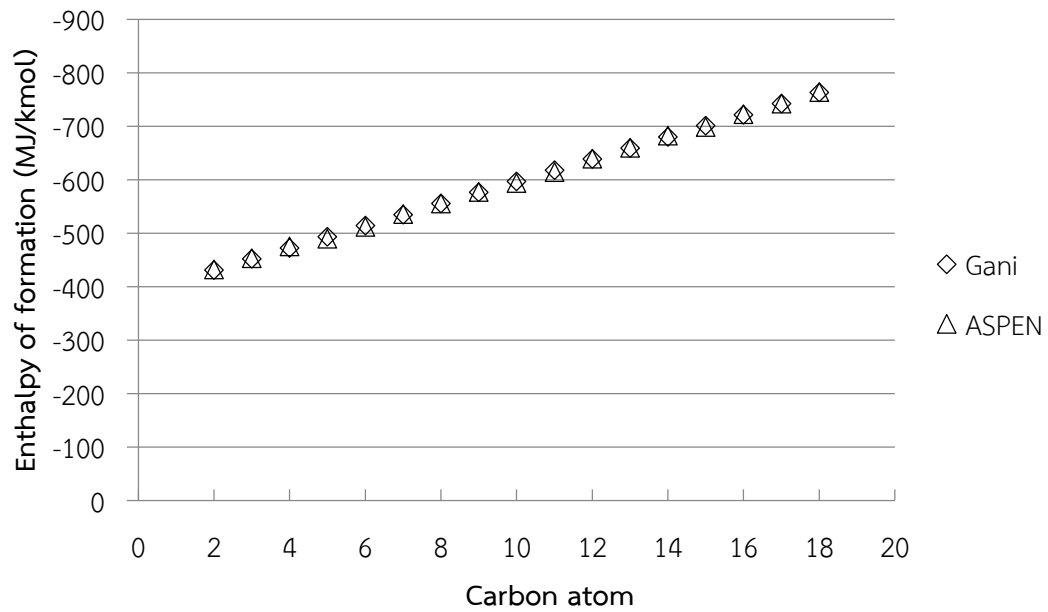
การทดสอบประมาณกรดไขมันนำผลการประมาณเปรียบเทียบกับข้อมูลที่มีอยู่ในหนังสือของ Perry และข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ข้อมูลสมบัติในการประกอบสารที่บันทึกอยู่ในหนังสือ Perry มีกรดไขมันสายตรงตั้งแต่ C2 – C10 ส่วนข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus บันทึกกรดไขมันตั้งแต่ C2 – C18 เนื่องจากข้อมูลของหนังสือ Perry ต่างจากข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus เพียง 2 สาร คือ C2 และ C3 จึงทำการเปรียบเทียบแค่ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบเอนทาลปีในการประกอบสาร

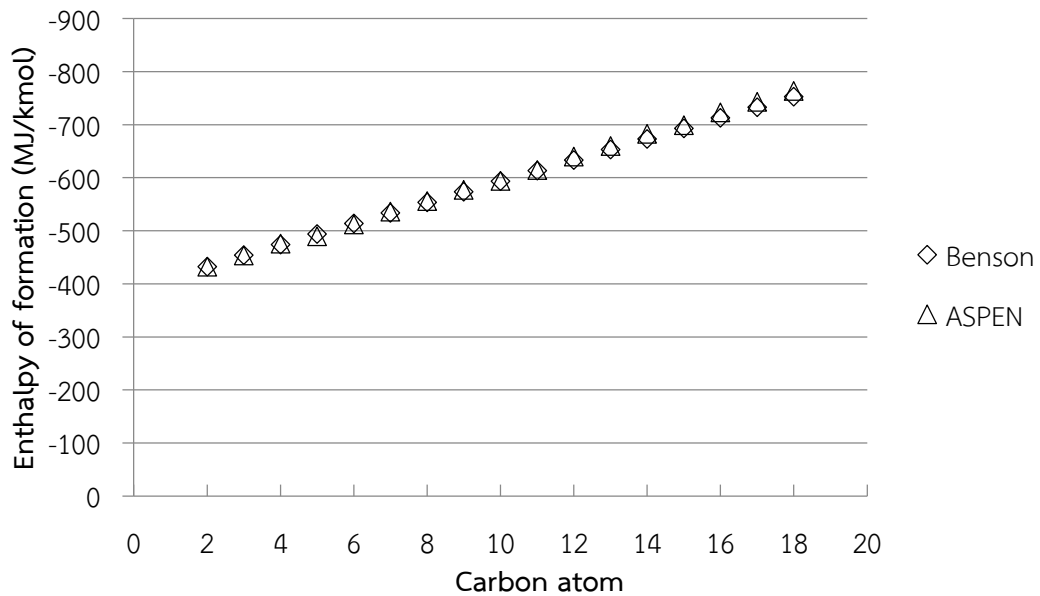
การประมาณเอนทาลปีของกรดไขมันเปรียบเทียบกับข้อมูลของกรดไขมันที่มีอยู่ในข้อมูลพื้นฐานของ ASPEN Plus พบว่า ทั้งวิธีการประมาณของ Joback (ภาพที่ 4.6) Gani (ภาพที่ 4.7) และ Benson (ภาพที่ 4.8) สามารถประมาณได้ใกล้เคียงกับข้อมูลที่สืบค้นได้ วิธีการประมาณเอนทาลปีของ Gani มีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับอีกสองวิธี โดยคลาดเคลื่อนมากที่สุดอยู่ที่ C5 (0.72 เปอร์เซ็นต์) และที่ C18 วิธีของ Gani เพียง 0.06 เปอร์เซ็นต์ ส่วนวิธีการประมาณเอนทาลปีของ Joback และ Benson สามารถประมาณ C18 คลาดเคลื่อน 0.15 และ 1.42 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ



ภาพที่ 4.6 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



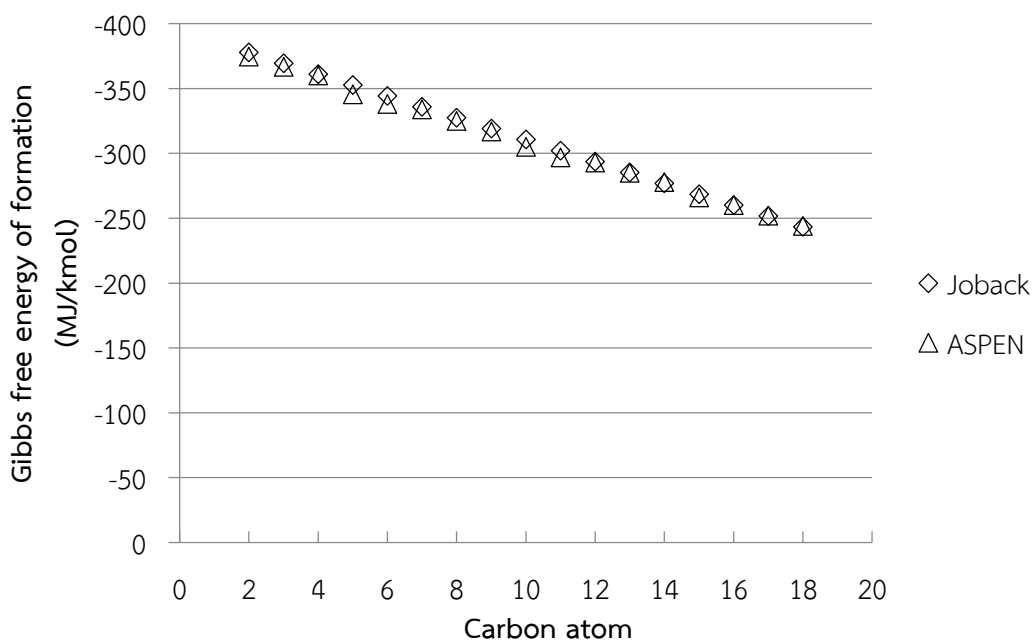
ภาพที่ 4.7 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



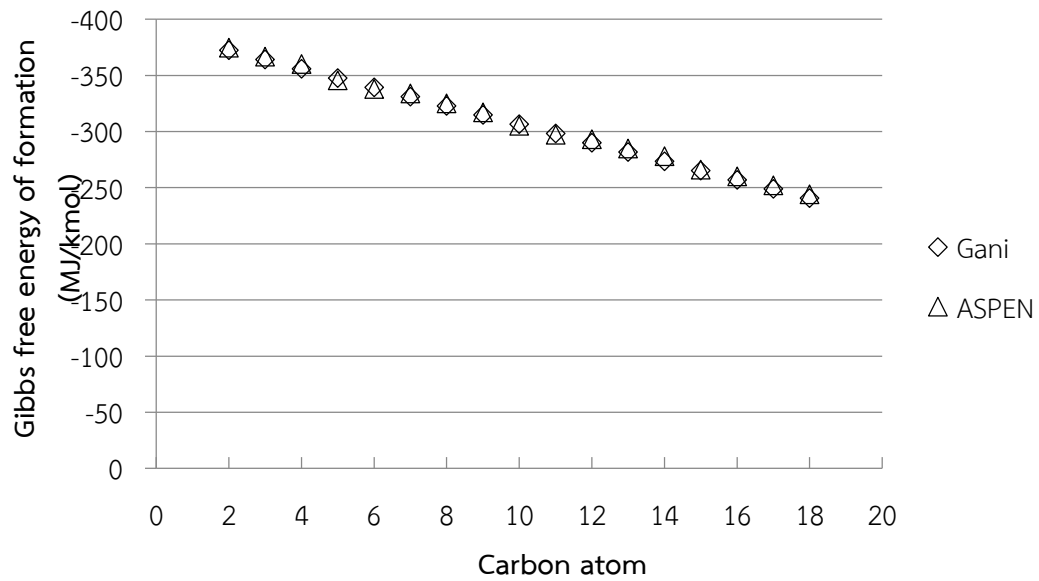
ภาพที่ 4.8 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร

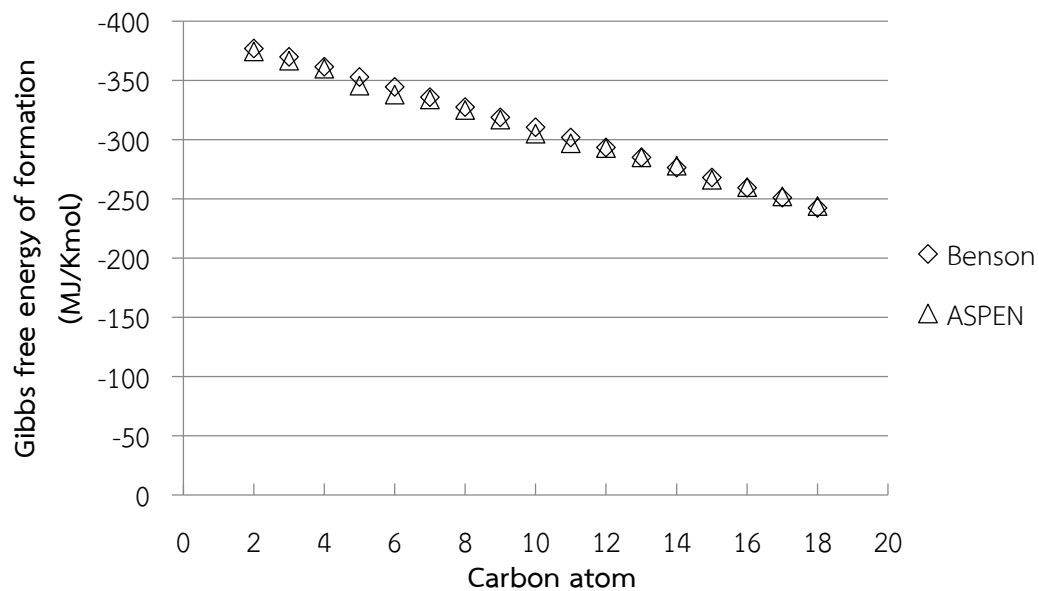
ข้อมูลพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมันในหนังสือ Perry แตกต่างจากข้อมูลพื้นฐานของ ASPEN Plus เล็กน้อยในกรดไขมันที่มีอะตอมคาร์บอนน้อย (C2 – C3) การเปรียบเทียบจึงทำการเปรียบกับสมบัติที่ประมาณเพียงข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus เท่านั้น วิธีการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารทั้ง 3 วิธี (Joback Gani และ Benson) ยังคงประมาณได้ใกล้เคียงกับข้อมูลที่อ้างอิง (ภาพที่ 4.9, 4.10 และ 4.11) โดยกรดไขมัน C18 มีความคลาดเคลื่อนของวิธีการประมาณของ Joback Gani และ Benson เป็น -0.32 -0.67 และ -1.39 เปอร์เซ็นต์ ตามลำดับ



ภาพที่ 4.9 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



ภาพที่ 4.10 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



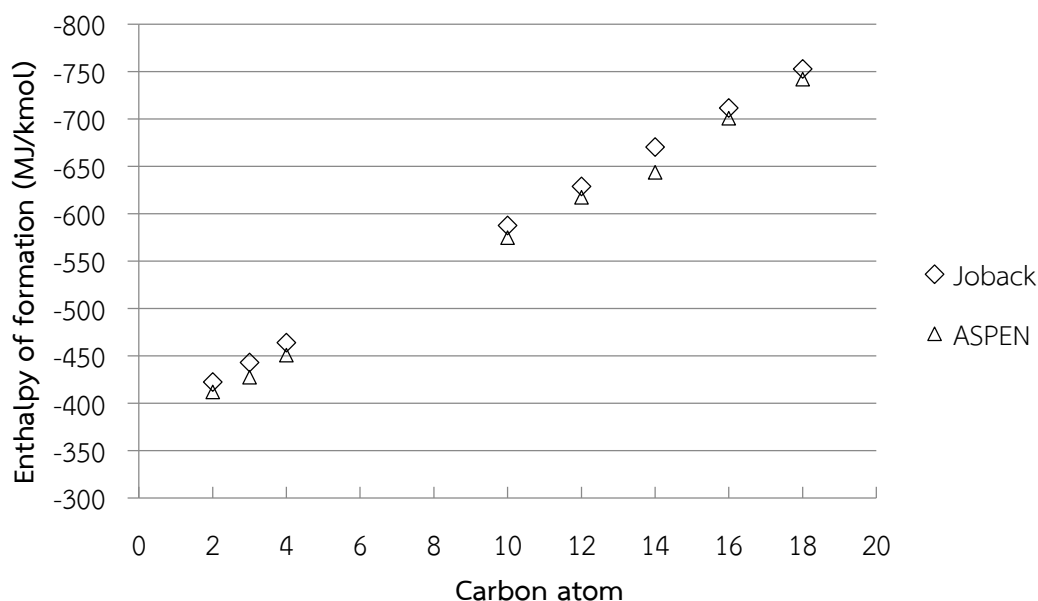
ภาพที่ 4.11 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมันด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การทดสอบประมาณเมทิลเอสเทอร์

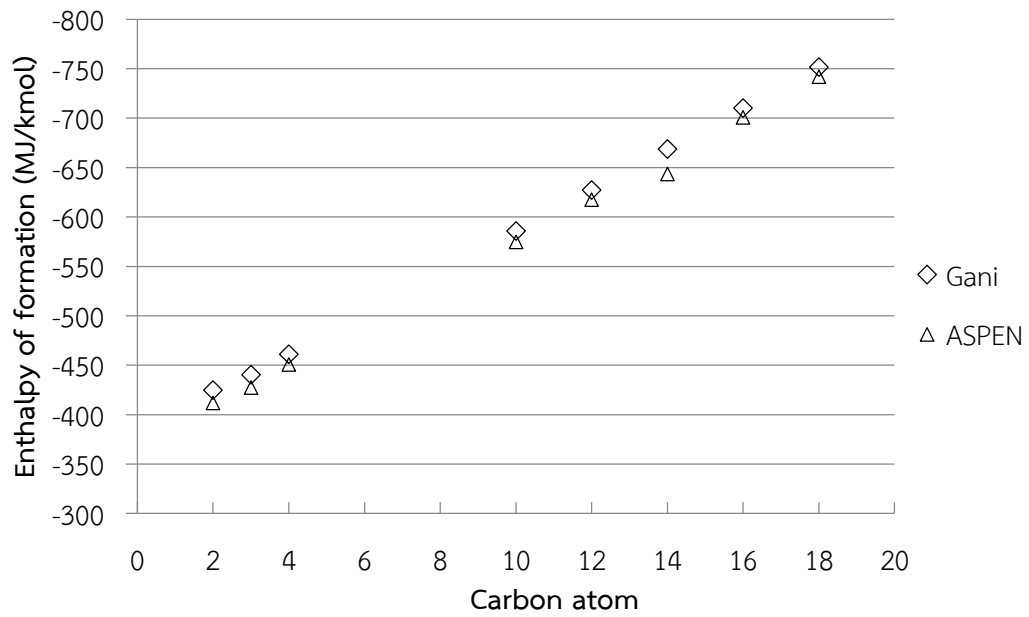
การทดสอบเปรียบเทียบเมทิลเอสเทอร์ ข้อมูลที่สืบค้นได้จากหนังสือของ Perry มีเพียง C2 – C4 ส่วนข้อมูลของเมทิลเอสเทอร์ในข้อมูลพื้นฐานของ ASPEN Plus ได้แก่ C2 – C4, C10, C12, C14, C16 และ C18 ซึ่งข้อมูลของหนังสือ Perry ทั้ง 3 สาร เหมือนกับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus จึงทำการเปรียบเทียบสมบัติที่ประมาณกับข้อมูลพื้นฐานจาก ASPEN Plus เช่นเดียวกับการทดสอบเปรียบเทียบกรดไขมัน

การเปรียบเทียบเอนทาลปีในการประกอบสาร

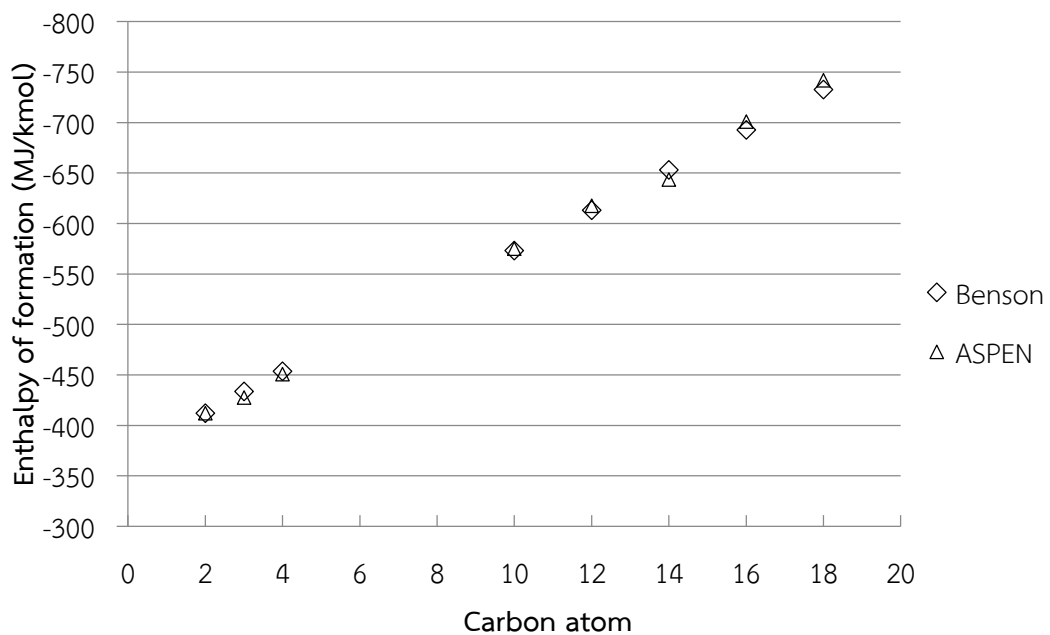
การเปรียบเทียบวิธีการประมาณเอนทาลปีด้วยวิธีการประมาณของ Joback (ภาพที่ 4.12) Gani (ภาพที่ 4.13) และ Benson (ภาพที่ 4.14) วิธีการประมาณเอนทาลปีของ Benson ให้ความแม่นยำมากที่สุด ใน 3 วิธี เมื่อพิจารณาความคลาด ช่วงที่อะตอมคาร์บอนน้อยวิธีของ Benson มีความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุด และที่ C18 ความคลาดเคลื่อนของการประมาณเอนทาลปีด้วยวิธี Joback Gani และ Benson เป็น -1.46, -1.33 และ 1.25 ตามลำดับ



ภาพที่ 4.12 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



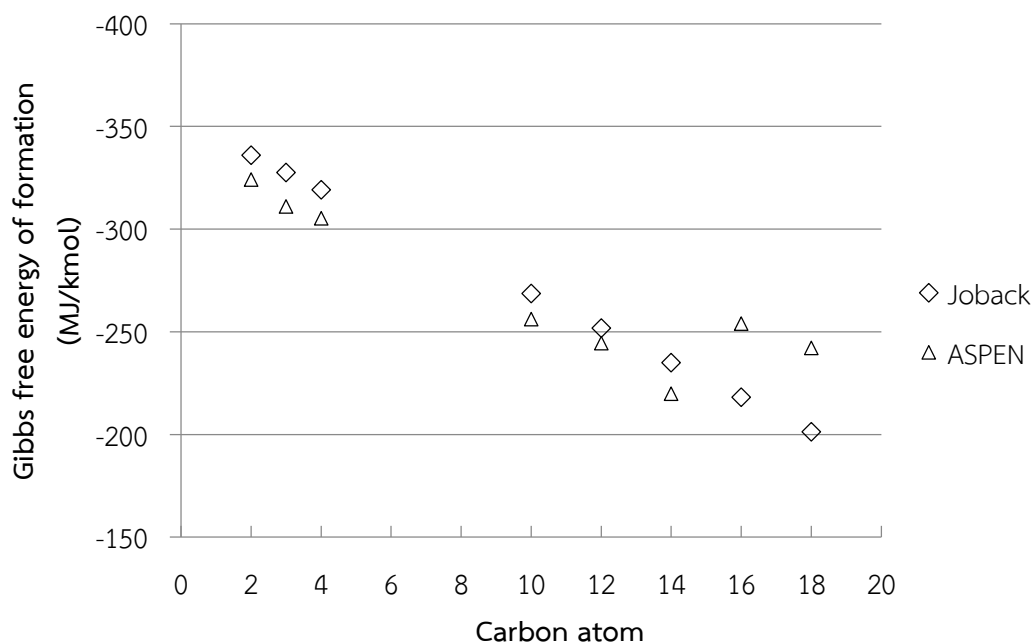
ภาพที่ 4.13 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



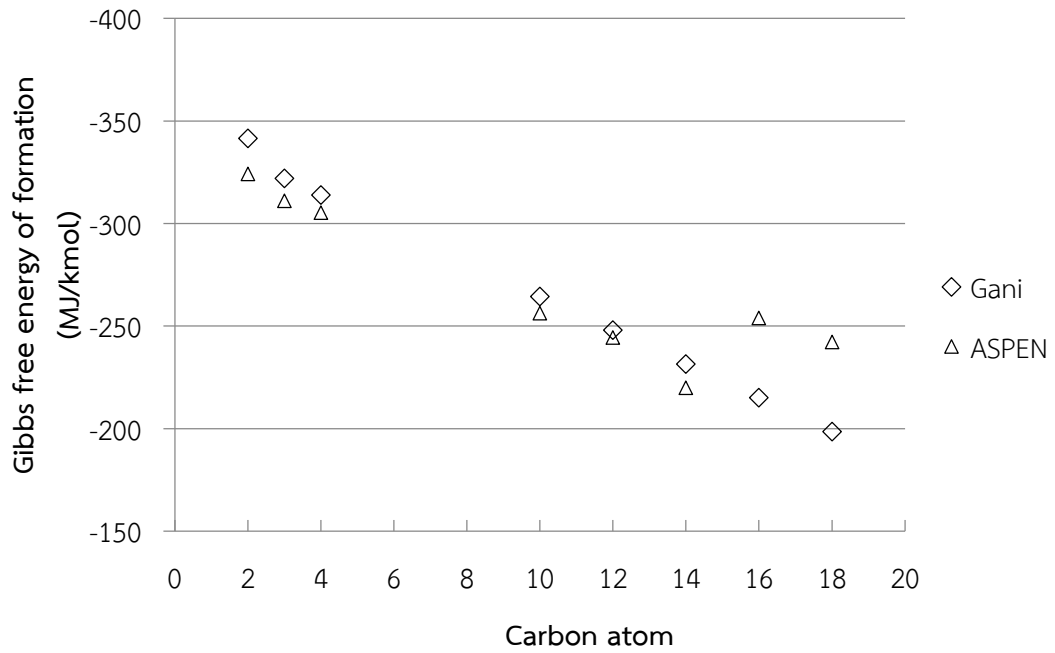
ภาพที่ 4.14 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

การเปรียบเทียบพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร

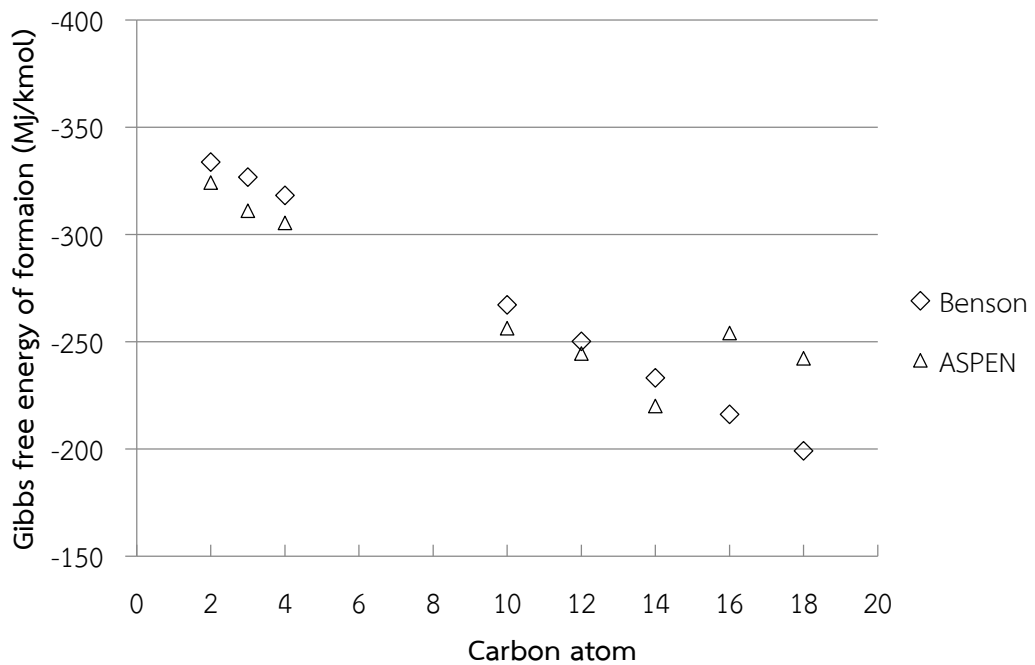
การประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารด้วยวิธีของ Joback Gani และ Benson ต่างก็มีแนวโน้มการเพิ่มขึ้นพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารคล้ายกัน ดังภาพที่ 4.15 4.16 และ 4.17 พบว่าข้อมูลพื้นฐานของ ASPEN Plus มีแนวโน้มของพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร แตกต่างออกไปตั้งแต่ C16 และ C18 เมื่อสังเกตการเปลี่ยนแปลงพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบของสารอัลเคน (Alkane) โข่ตรง อัตราการเปลี่ยนแปลงของพลังงานอิสระกิบส์จะมีแนวโน้มไปในทิศทางเดียวกันดังภาพที่ 4.18 ซึ่งสามารถเปรียบเทียบขั้นต้นได้กับสารเมทิลเอสเทอร์เนื่องจากมีลักษณะเป็นโขนตรงเช่นเดียวกัน ดังนั้นการที่ C16 และ C18 ไม่อยู่ในแนวโน้มเดียวกับสารอื่นๆ อาจเกิดจากแหล่งข้อมูลที่ทางซอฟต์แวร์ ASPEN Plus นำมาบันทึกลงในข้อมูลพื้นฐานของ C16 และ 18 ใช้สมมติฐาน หรือสภาวะเพื่อให้ได้มาซึ่งพลังงานอิสระกิบส์ต่างกัน จึงไม่นำ C16 และ C18 มาพิจารณาเปรียบเทียบ โดยความคลาดเคลื่อนของการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ของ C12 ของทั้งสามวิธี จะอยู่ระหว่าง 5 – 7 เปอร์เซ็นต์ นอกจากนี้การทดสอบการประมาณสารได้เสริมการเปรียบเทียบอัลเคนเข้ามาเพื่อให้เข้าใจเกี่ยวข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ที่ต่างออกไป



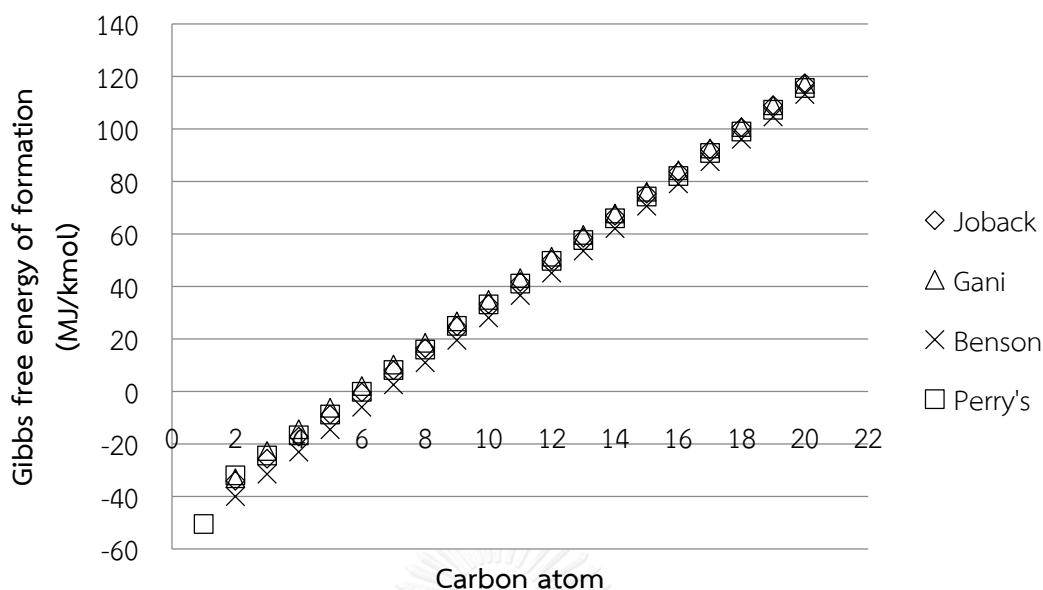
ภาพที่ 4.15 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ ด้วยวิธีของ Joback กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



ภาพที่ 4.16 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ ด้วยวิธีของ Gani กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



ภาพที่ 4.17 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ด้วยวิธีของ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus



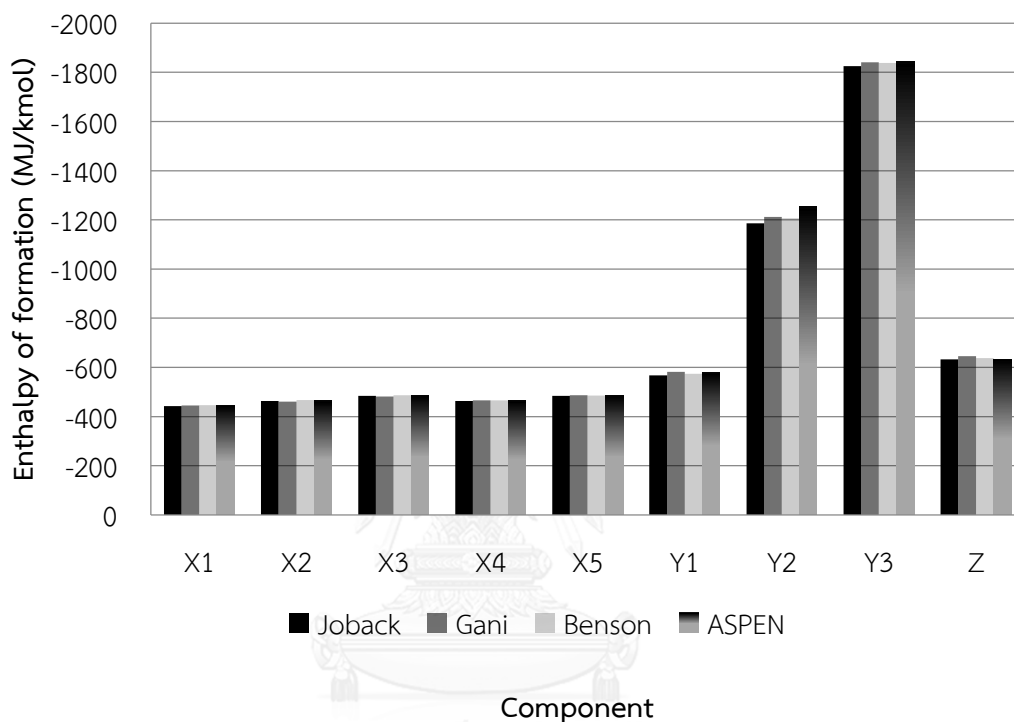
ภาพที่ 4.18 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ประกอบสารของอัลเคนด้วยวิธีต่างๆ กับข้อมูลในหนังสือของ Perry

การทดสอบประมาณสารอื่นๆ

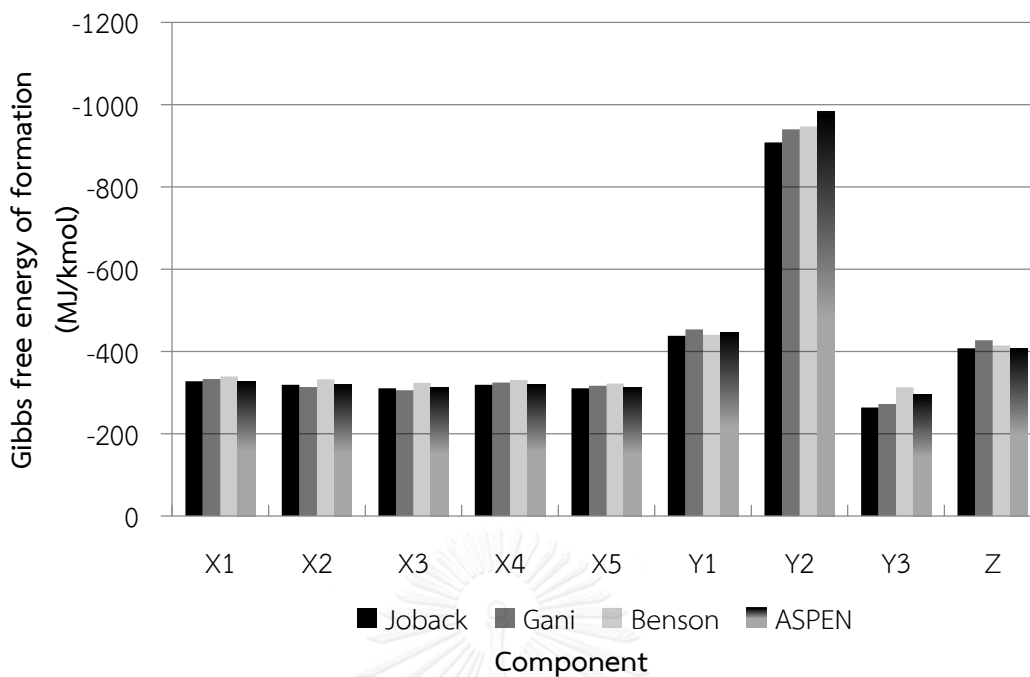
การทดสอบเปรียบเทียบสารอื่นๆ ถูกปฏิบัติขึ้นเพื่อให้เกิดความมั่นใจในการใช้วิธีการประมาณ และช่วยในการตัดสินใจในการเลือกวิธีที่เหมาะสมกับงาน สารที่ถูกนำมาพิจารณา ได้แก่ Ethyl acetate, Ethyl propionate, Ethyl butyrate, Propyl acetate, Butyl acetate, Glycerol, Triacetin (Glyceryl triacetate), Trioleate (Glyceryl trioleate) และ TMP โดยสารที่เลือกมีลักษณะคล้ายคลึงกัน สารที่นำมาพิจารณามีข้อมูลอยู่ในข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN ทั้งหมด ข้อมูลของหนังสือ Perry มีเพียงสาร Ethyl acetate, Ethyl propionate, Ethyl butyrate, Propyl acetate และ Butyl acetate เท่านั้น โดยเอนทัลปีและพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของหนังสือ Perry เท่ากันกับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

จากภาพที่ 4.19 การประมาณเอนทัลปีด้วยวิธีต่างๆ จะมีค่าใกล้เคียงกับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ความคลาดเคลื่อนในการประมาณเอนทัลปี สารจำพวก Ethyl, Propyl และ Butyl ของทั้ง 3 วิธี มีความคลาดเคลื่อนไม่เกิน 1 เปอร์เซ็นต์ ส่วนสารจำพวก Glyceryl มีค่าแตกต่างกันโดยเฉพาะอย่างยิ่ง Glyceryl triacetate ซึ่ง Joback มีความคลาดเคลื่อน -5.31 เปอร์เซ็นต์ ในขณะที่ Gani และ Benson มีความคลาดเคลื่อนของการประมาณ Glyceryl triacetate -3.29 และ -3.64 ตามลำดับ ในขณะที่เมื่อพิจารณาสาร TMP ซึ่งเป็นสารที่ใช้ในการจำลองกระบวนการพบว่า วิธีการประมาณเอนทัลปีของ Joback ประมาณได้ใกล้เคียงมากที่สุด ตามด้วย Benson และ

Gani รองลงมา ส่วนการเปรียบเทียบพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร พบว่าวิธีการประมาณของ Benson มีความคลาดเคลื่อนมากที่สุดในสารจำพวก Ethyl, Propyl และ Butyl ดังภาพที่ 4.20 โดยมีความคลาดเคลื่อนไม่เกิน 4 เปอร์เซ็นต์ แต่ประมาณได้ดีกว่า Joback และ Gani ในสารที่มีโครงสร้างซับซ้อนกว่า เช่น สารจำพวก Glycerol



ภาพที่ 4.19 การเปรียบเทียบการประมาณเอนทาลปีในการประมาณสารของสารต่างๆ ด้วยวิธีของ Joback Gani และ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ; X1/Ethyl acetate, X2/Ethyl propionate, X3/Ethyl butyrate, X4/Propyl acetate, X5/Butyl acetate, Y1/Glycerol, Y2/Triacetin, Y3/Triolein, Z/TMP



ภาพที่ 4.20 การเปรียบเทียบการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของสารต่างๆ ด้วยวิธีของ Joback Gani และ Benson กับข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus ; X1/Ethyl acetate, X2/Ethyl propionate, X3/Ethyl butyrate, X4/Propyl acetate, X5/Butyl acetate, Y1/Glycerol, Y2/Triacetin, Y3/Triolein, Z/TMP

จากการเปรียบเทียบการประมาณสมบัติในการประกอบสารด้วยเกรดไขมัน เมทิลเอสเทอร์ และสารต่างๆ พิจารณาเลือกวิธีการประมาณด้วยการนำความคลาดเคลื่อนมาเฉลี่ยด้วยน้ำหนัก

$$\text{โมเลกุลตามสมการ } \%Error = \frac{\sqrt{\sum_i (M_{wi} (\%E)_i)^2}}{\sum_i M_{wi}} \text{ เช่นเดียวกับการประมาณสารทั่วไป พบว่าวิธีที่}$$

เหมาะสมที่สุด คือ วิธีการประมาณของ Benson ดังตารางที่ 4.2 วิธีการประมาณของ Benson มีความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการประมาณของ Joback และ Gani ดังนั้นจึงเลือกวิธีของ Benson ในการประมาณสมบัติในการประกอบสาร

ตารางที่ 4.2 ความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยในการประมาณสมบัติในการประกอบสารของการประมาณด้วยวิธี Joback Gani และ Benson เมื่อเปรียบเทียบกับข้อมูลของหนังสือ Perry และ ข้อมูลพื้นฐานของซอฟต์แวร์ ASPEN Plus

	Joback	Gani	Benson
Enthalpy of formation	0.35	0.25	0.22
Gibbs free energy of formation	1.80	1.35	0.91
เฉลี่ย	1.08	0.8	0.56

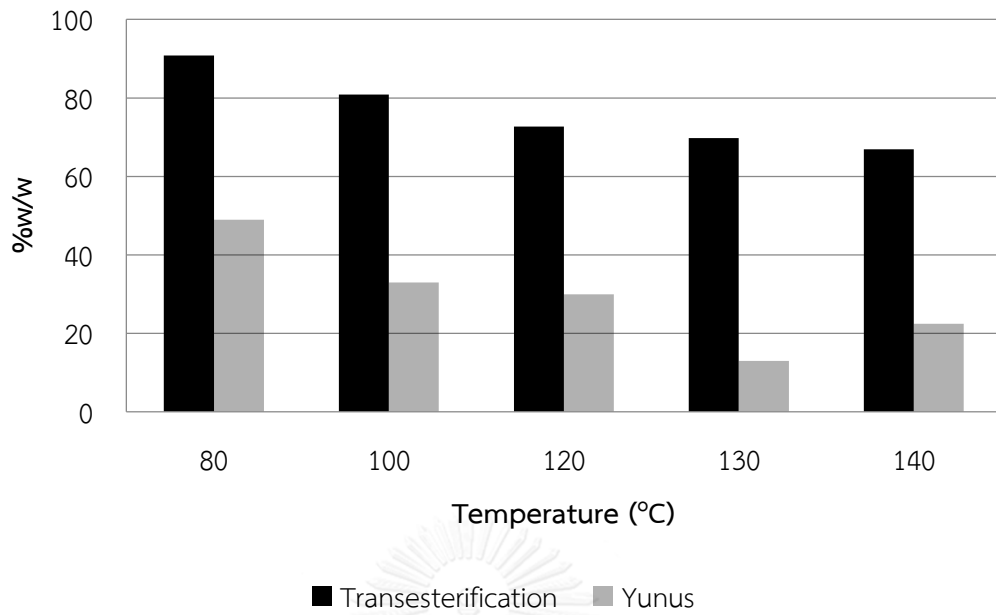


บทที่ 5 การจำลองปฏิกิริยา

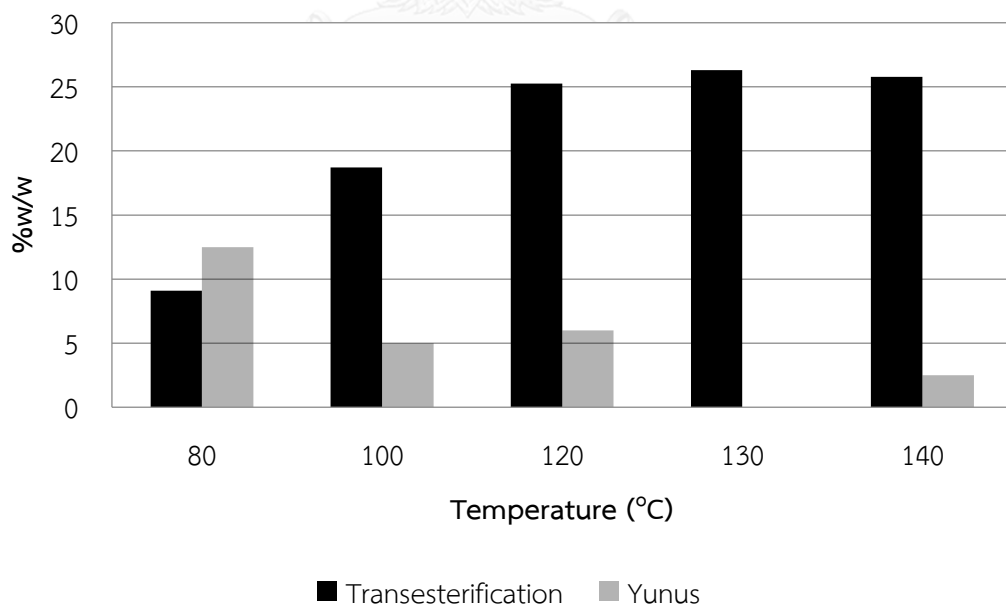
การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters จากน้ำมันปาล์ม กระทำในซอฟต์แวร์ ASPEN Plus โดยใช้เครื่องมือที่มีชื่อว่า REequi (Equilibrium reactor) ซึ่งหลักการคำนวณของเครื่องมือนี้ใช้หลักการของสมดุลเคมี โดยการป้อนสมการเคมีเข้าไปในเครื่องมือพร้อมกับระบุสถานะในการทำปฏิกิริยา การจำลองการสังเคราะห์ปฏิบัติตามสภาวะการทดลองของ Yunus และคณะ (2003)

5.1 ปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน

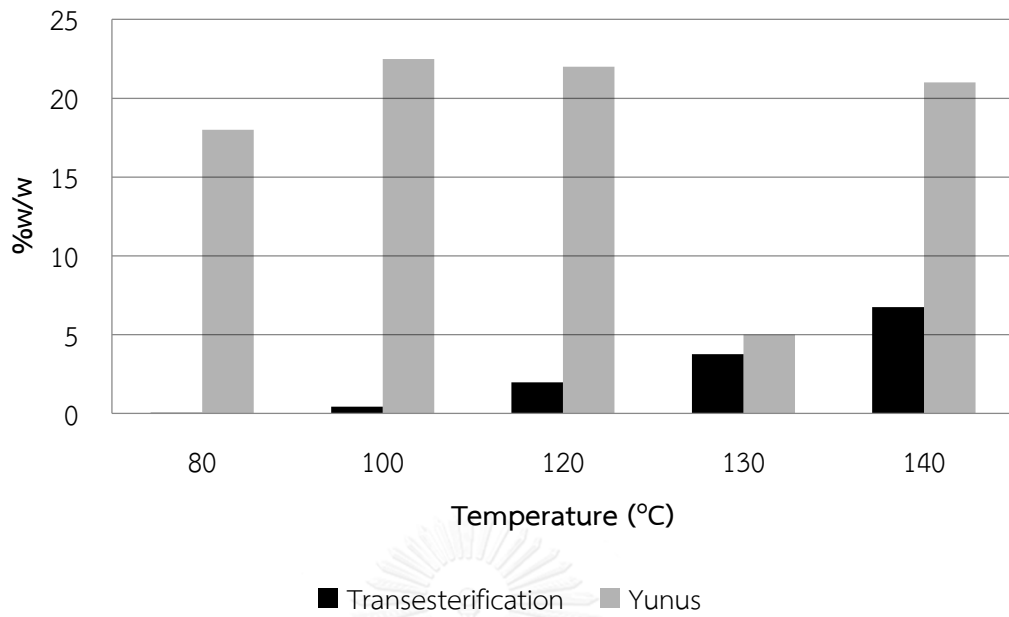
อันดับแรกจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน เนื่องจากเป็นปฏิกิริยาการเกิด TMP esters จาก TMP และ เมทิลเอสเทอร์ ตามที่การทดลองของ Yunus และคณะ ได้กล่าวไว้ ผลของการจำลองปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน พบว่า POME (Palm oil methyl esters) ยังเหลืออยู่ในปริมาณมาก ดังภาพที่ 5.1 แม้อุณหภูมิจะสูงขึ้น POME ยังคงเหลืออยู่ประมาณ 70 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ในขณะที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ผลจากการทดลองเหลือ POME อยู่เพียง 13 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ Mono-esters ของการจำลองปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันมีปริมาณสัดส่วนในผลิตภัณฑ์มากกว่าการทดลอง (ภาพที่ 5.2) เนื่องจากการจำลองเกิดเพียง Mono-esters และเกิดปฏิกิริยาต่อไปเป็น Di-esters และ Tri-esters ได้น้อย โดยมี Di-esters ในผลิตภัณฑ์ประมาณ 0 – 7 เปอร์เซ็นต์ และ Tri-esters ประมาณ 0 – 0.5 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ (ภาพที่ 5.3 และ 5.4)



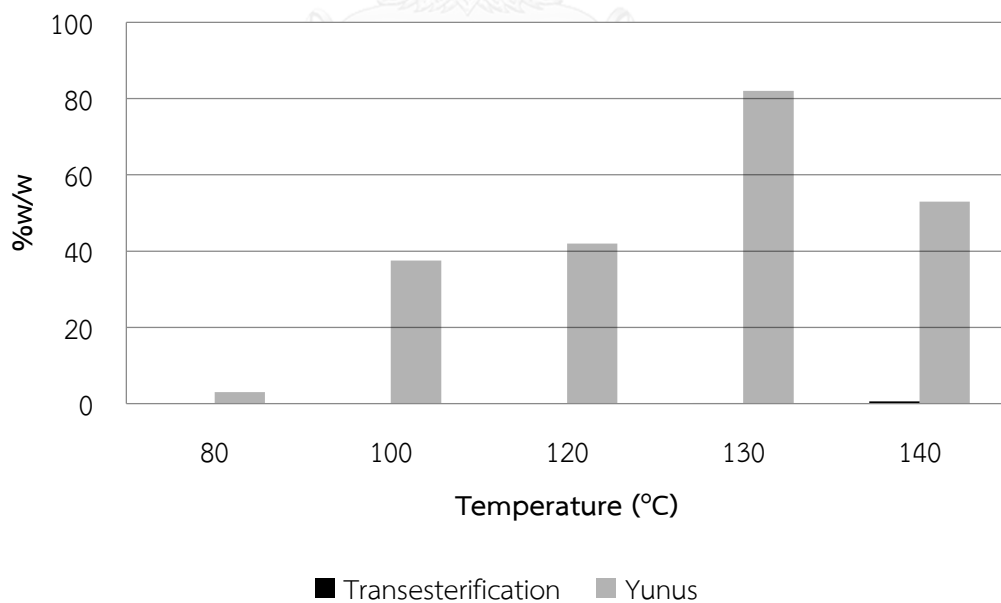
ภาพที่ 5.1 ปริมาณของ POME ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.2 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ

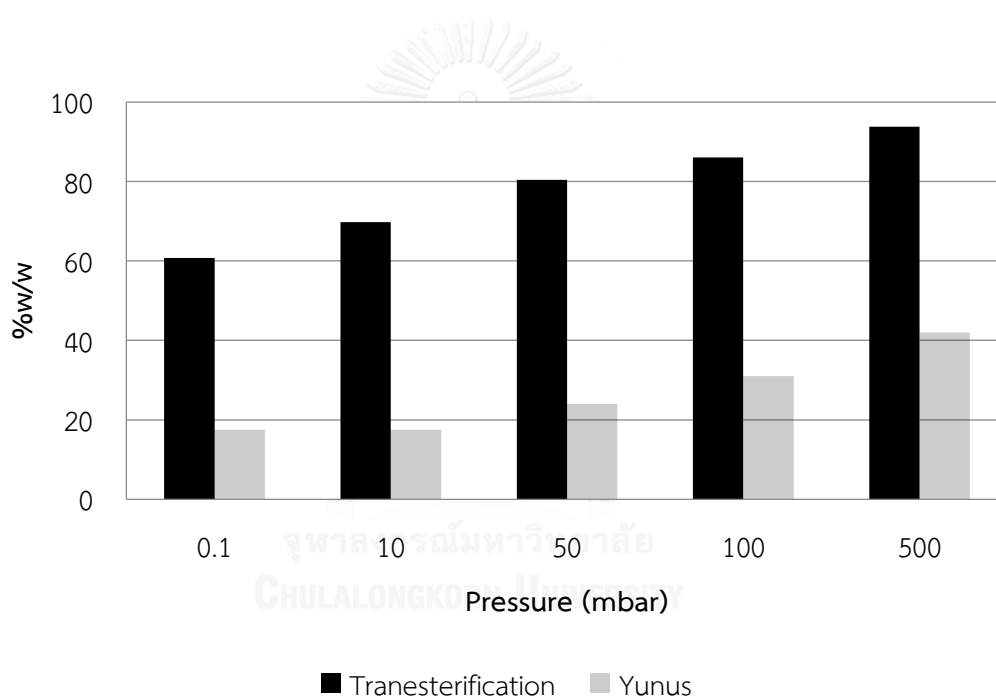


ภาพที่ 5.3 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ

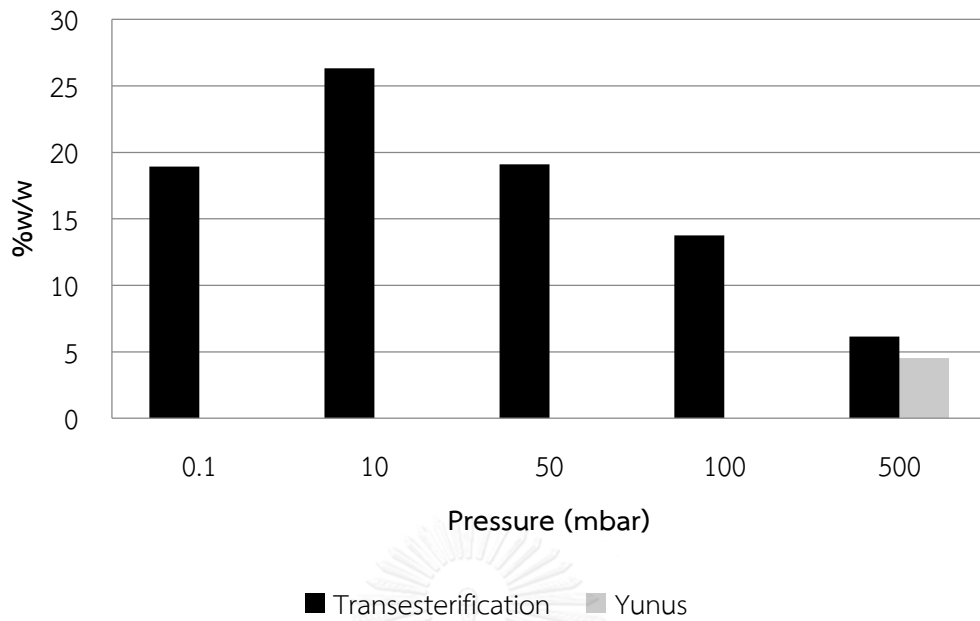


ภาพที่ 5.4 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ

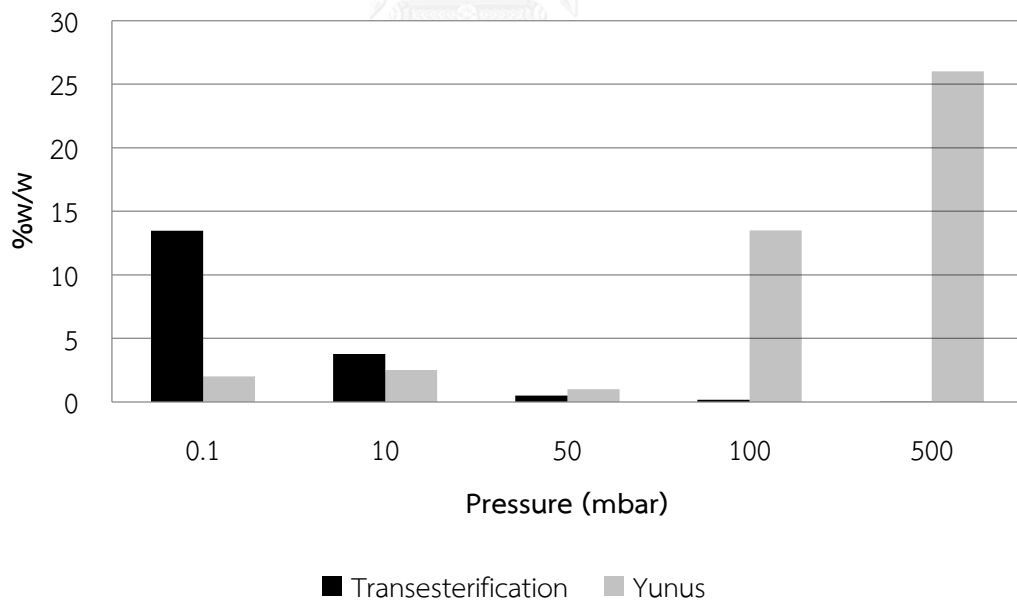
พิจารณาผลการจำลองเปลี่ยนแปลงความดัน เมื่อนำสภาวะตามการทดลองของ Yunus และคณะ มาทำการจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชัน TMP esters เกิดขึ้นได้ยากเช่นเดียวกับการจำลองการเปรียบเทียบอุณหภูมิ โดย POME ยังคงเหลืออยู่ค่อนข้างมาก และทำปฏิกิริยากับเมทิลเอสเทอร์ได้ค่อนข้างน้อยทำให้ผลิตภัณฑ์ Mono-esters เกิดขึ้นได้น้อยตาม ส่งผลให้มี Di-esters และ Tri-esters น้อยมากในผลิตภัณฑ์ POME มี POME เหลือในผลิตภัณฑ์ แตกต่างกันมากกว่า 40 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.5 Mono-esters ของการจำลอง แตกต่างกับการทดลองเช่นกันดังภาพที่ 5.6 Di-esters และ Tri-esters เกิดได้น้อยมาก ดังภาพที่ 5.7 และ 5.8 แสดงให้เห็นว่าการจำลองปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันไม่เป็นไปตามการทดลองของ Yunus และคณะ



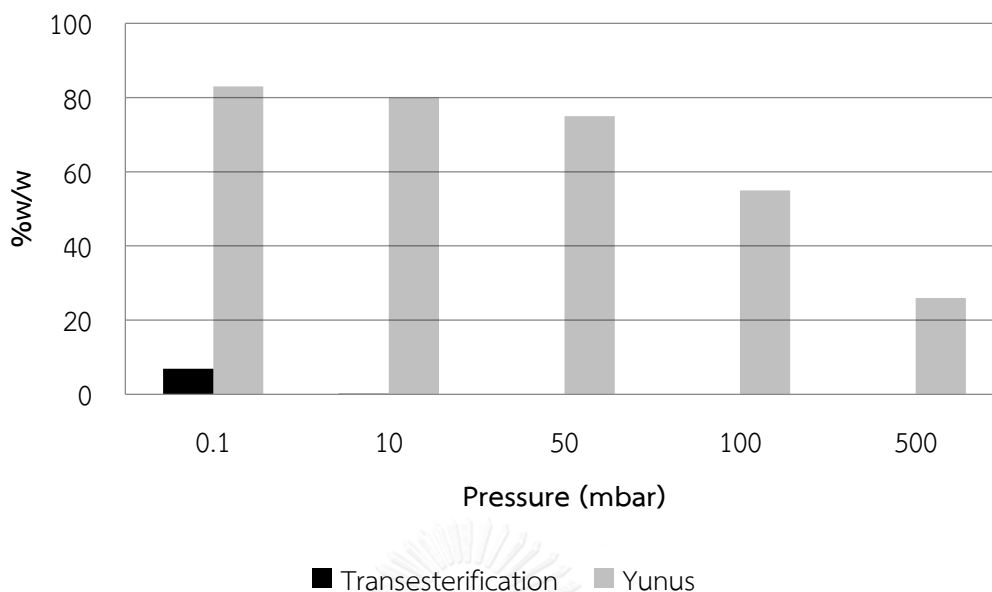
ภาพที่ 5.5 ปริมาณของ POME ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.6 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.7 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันเปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ



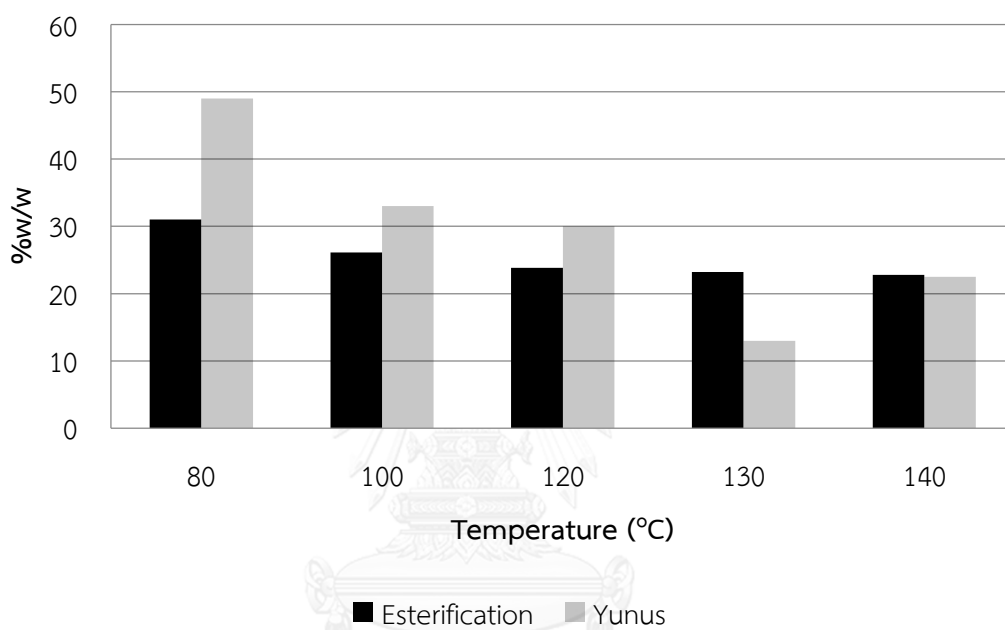
ภาพที่ 5.8 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ

การจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันให้ผลลัพธ์แตกต่างไปจากการทดลองการสังเคราะห์ TMP esters ของ Yunus และคณะ เมื่อพิจารณาค่าพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกิริยาที่เป็นส่วนสำคัญในการจำลองกระบวนการโดยใช้หลักการสมดุลเคมีเป็นหลัก ซึ่งคำนวณโดยใช้สมการ $\Delta G_{rxn} = \Delta G_f(\text{product}) - \Delta G_f(\text{reactant})$ โดย G_{rxn} คือพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกิริยา G_f คือ พลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสาร พบว่า พลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันมีค่าเป็นบวกทำให้เกิดปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเป็นไปได้ยาก

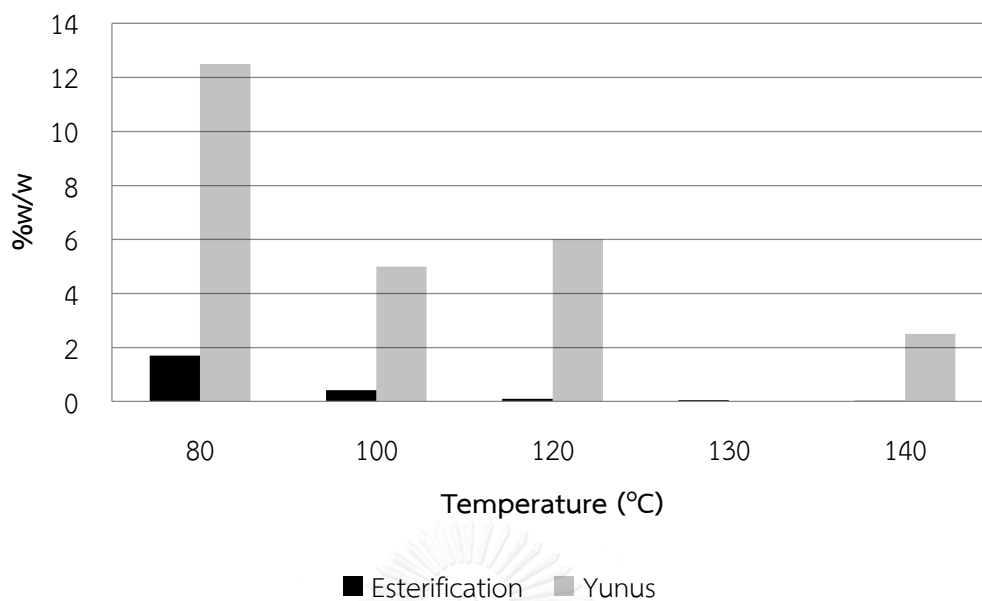
5.2 ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน

ทำการจำลองการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันโดยมี กรดไขมันจากน้ำมันปาล์ม (Palm oil fatty acid, POFA) เป็นสารตั้งต้นแทนเมทิลเอสเทอร์ การจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ ปริมาณของ POFA ของการจำลองเทียบกับ POME ของการทดลองแสดงดังภาพที่ 5.9 พบว่า ปริมาณของ POFA ใกล้เคียงกันกับ POME ของการทดลอง ที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส การจำลองมี POFA แตกต่างกับการทดลอง ประมาณ 10 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ เช่นเดียวกับกับ POFA ปริมาณของ Mono-esters ที่ได้ก็คล้ายคลึงกับการทดลอง โดยมี Mono-esters เหลืออยู่น้อยกว่าการทดลองราวๆ 5 – 10 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.10 ส่วน Di-esters แตกต่างกับ

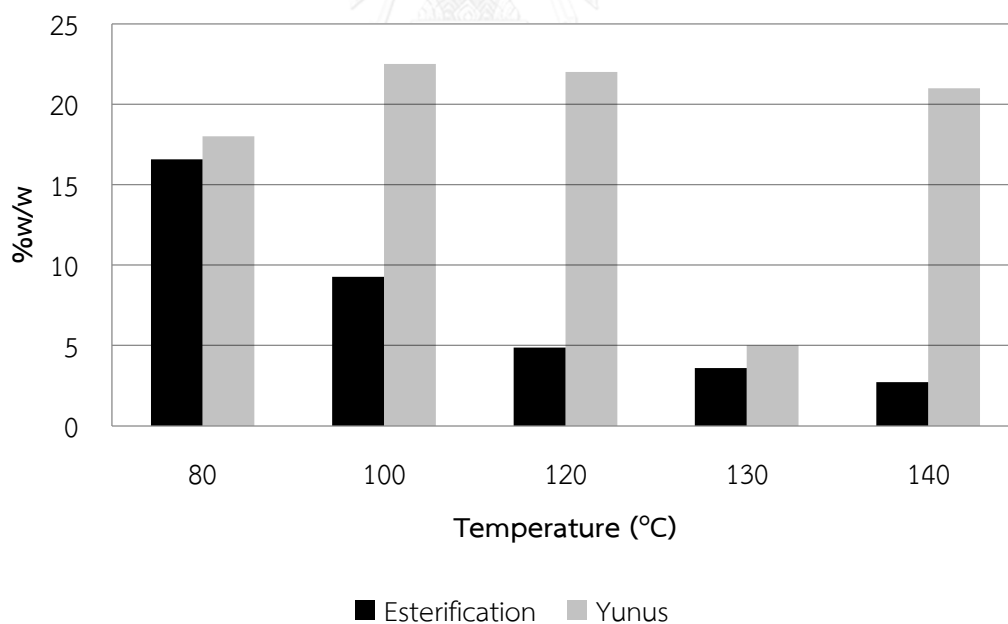
ผลการทดลองในช่วงอุณหภูมิ 110 และ 120 องศาเซลเซียส ดังภาพที่ 5.11 ส่วนที่ 140 องศาเซลเซียส เป็นผลมาจากข้อจำกัดของการทดลองซึ่ง Yunus และคณะได้กล่าวไว้ เมื่อพิจารณาปริมาณของ Tri-esters การจำลองได้ปริมาณของ Tri-esters ที่มากกว่าการทดลอง แตกต่างกัน 10 – 30 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.12



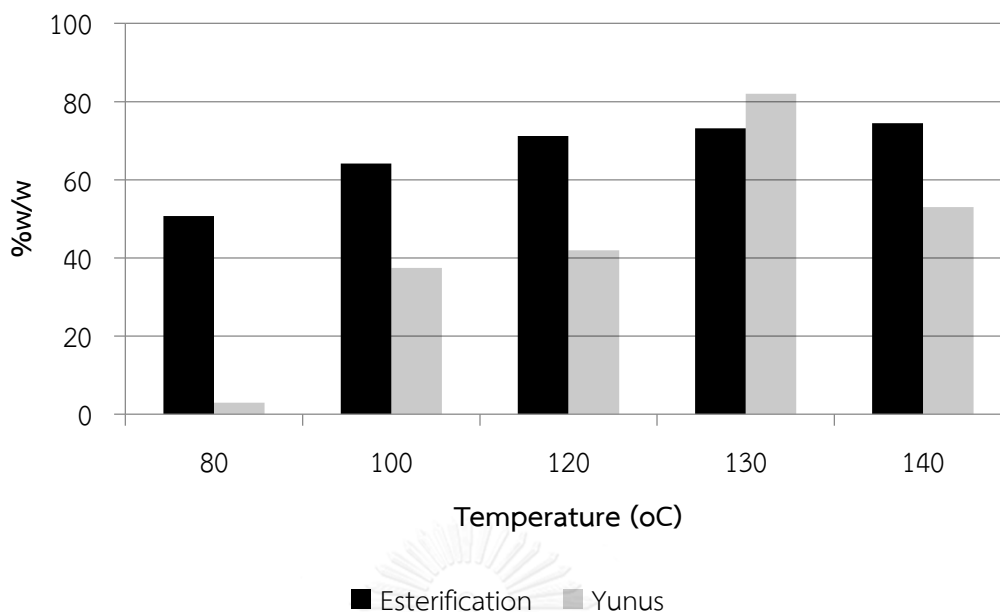
ภาพที่ 5.9 ปริมาณของ POFA ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน
เปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.10 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับการทดลองของ Yunus และคณะ

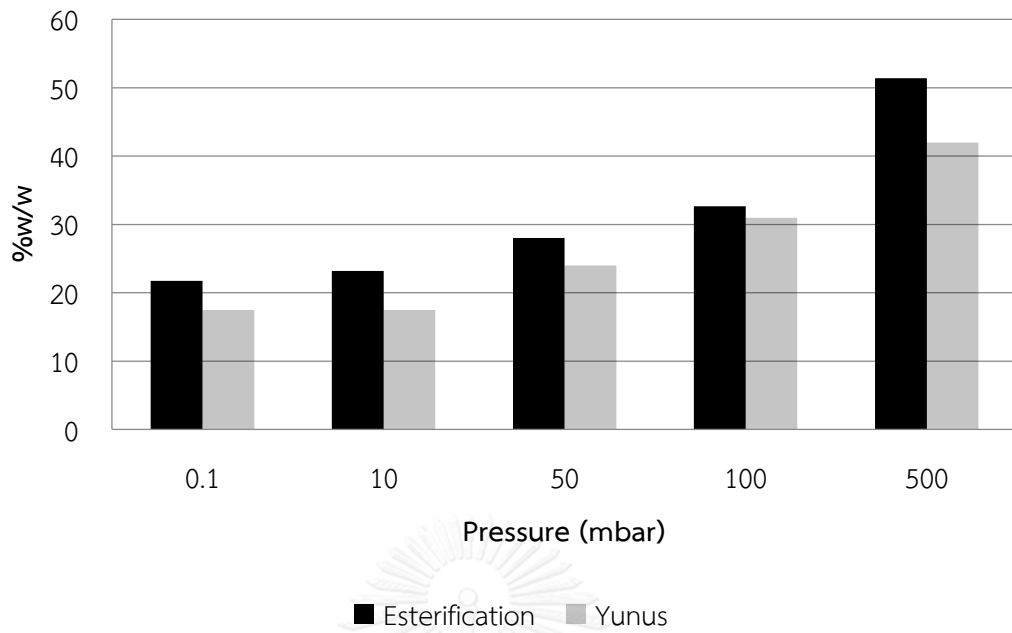


ภาพที่ 5.11 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับการทดลองของ Yunus และคณะ

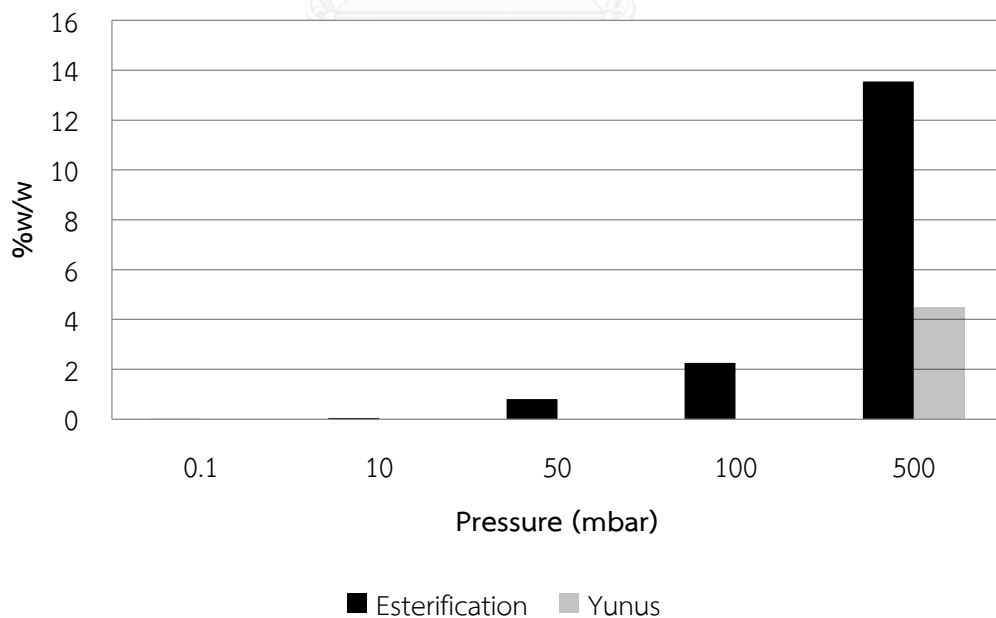


ภาพที่ 5.12 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน เปรียบเทียบกับการทดลองของ Yunus และคณะ

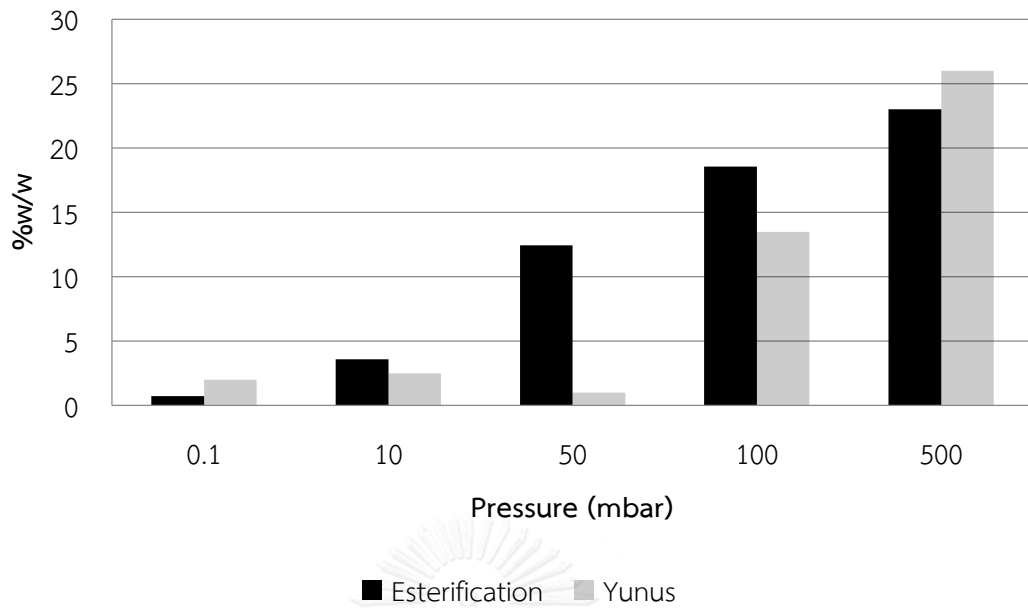
การจำลองการสังเคราะห์ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันในส่วนของ การเปลี่ยนแปลงความดันพบว่า ปริมาณของ POFA จากการจำลองแตกต่างกับ POME ของการจำลองไม่ถึง 10 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.13 Mono- esters ปริมาณคล้ายกับการทดลองแต่แตกต่างที่ความดัน 500 มิลลิบาร์ โดยแตกต่างกันประมาณ 10 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.14 Di-esters ผลการจำลองแตกต่างที่สุดที่ความดัน 50 มิลลิบาร์ แตกต่างประมาณ 12 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.15 ส่วน Tri-esters ลดลงตามความดันที่เพิ่มขึ้น หรือก็คือ ปฏิกิริยาการสังเคราะห์เกิดขึ้นได้ดีใน ความดันที่น้อย อัตราการลดลงของ Tri-esters น้อยที่สุดที่ความดัน 0.1 มิลลิบาร์และอัตราการลดลง เพิ่มขึ้นเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น ในขณะที่ความดัน 50 มิลลิบาร์ มีความแตกต่างของ Tri-esters มากที่สุดคือ 16.3 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์ ดังภาพที่ 5.16 ดังนั้นเมื่อเปรียบเทียบผลการจำลองกับการทดลองต่างๆ แล้ว อาจกล่าวได้ว่าผลของการจำลองด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันระหว่าง TMP และ กรดไขมันสอดคล้องกับการจำลองของ Yunus และคณะ มากกว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน



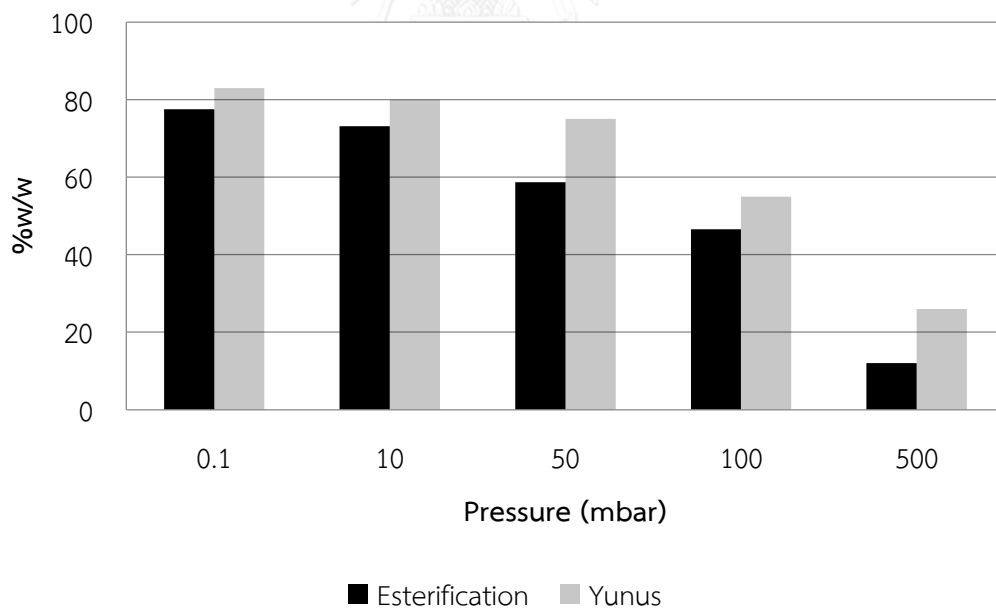
ภาพที่ 5.13 ปริมาณของ POFA ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน
เปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.14 ปริมาณของ Mono-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน
เปรียบเทียบกับ การทดลองของ Yunus และคณะ



ภาพที่ 5.15 ปริมาณของ Di-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน
เปรียบเทียบกับการทดลองของ Yunus และคณะ



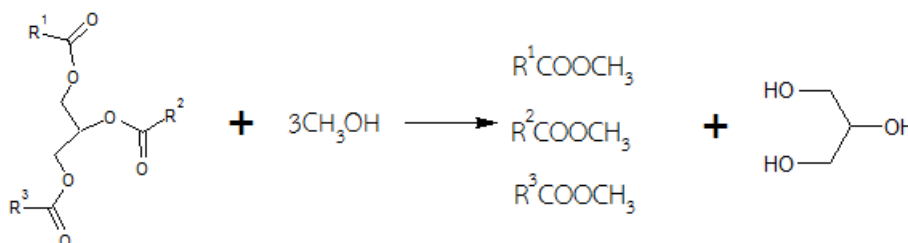
ภาพที่ 5.16 ปริมาณของ Tri-esters ในการจำลองเปลี่ยนแปลงความดันด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน
เคชั่นเปรียบเทียบกับการทดลองของ Yunus และคณะ

พิจารณาเกี่ยวกับความเป็นไปได้ของปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน จากข้อมูลของการทดลอง Yunus และคณะ กล่าวว่า การสังเคราะห์ TMP esters มีผลิตภัณฑ์ส่วนหนึ่งเป็นกรดไขมันอิสระ ประมาณ 2 - 5 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์จากการทดลองหาปริมาณของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เหมาะสมในการสังเคราะห์ TMP esters เป็นไปได้ว่าการสังเคราะห์ที่มีบางส่วนเกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสเกิดขึ้นดังภาพที่ 5.17 Yunus และคณะกล่าวอีกว่ามีน้ำอยู่ในสารตั้งต้นด้วย แต่เมื่อพิจารณาสภาวะที่ทำการทดลองแล้วไม่เหมาะสมที่จะทำให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสได้ จึงมีแนวโน้มว่าตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสาเหตุหนึ่งที่ทำให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสเกิดขึ้น อันเป็นเหตุให้เมทิลเอสเทอร์เกิดปฏิกิริยากลายเป็นกรดไขมัน ซึ่งการทดลองการสังเคราะห์ TMP esters นี้ Yunus และคณะ ใช้ โซเดียมเมทอกไซด์ (Sodium methoxide) เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โซเดียมเมทอกไซด์มีส่วนช่วยให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส (Schuchardt, Sercheli & Vargas, 1998: 199-210)



ภาพที่ 5.17 ปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส

เมื่อพิจารณาถึงสาเหตุที่ทำให้การจำลองปฏิกิริยาทานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ไม่สามารถปฏิบัติได้ เช่นเดียวกับการทดลอง ทำการจำลองเพิ่มเติมเกี่ยวกับปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซล โดยปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซลแสดงดังภาพที่ 5.18 ทำการจำลองสารตั้งต้น 2 สาร ได้แก่ ไตรปาล์มมิติน (Tripalmitin, Glycerol tripalmitate) และ ไตรโอเลอิน (Triolein, Glycerol trioleate)



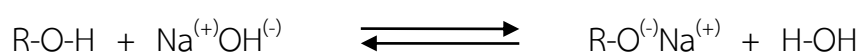
ภาพที่ 5.18 ปฏิกิริยาการผลิตไบโอดีเซล

เนื่องจากทั้งสองสารนี้มีอยู่มากในน้ำมันปาล์มที่นำมาใช้ในการผลิตไบโอดีเซล จากการจำลองพบว่า ทั้งไตรปาล์มิตินและไตรโอเลอินสามารถเกิดปฏิกิริยากับเมทานอลและให้ผลิตภัณฑ์ ได้แก่ เมทิลเอสเทอร์ และ กรีเซอร์อล ได้ทั้งหมด (การประมาณสมบัติของสารใช้วิธีของ Gani และ Benson ซึ่งได้คัดเลือกวิธีการในบทที่ 4) และเมื่อทำการจำลองย้อนกลับปฏิกิริยาโดยนำเมทิลเอสเทอร์ทำปฏิกิริยากับกรีเซอร์อล ผลลัพธ์ได้ไตรกรีเซอร์อลในผลิตภัณฑ์น้อยมาก ซึ่งปฏิกิริยาย้อนกลับของการผลิตไบโอดีเซลนี้คล้ายคลึงกับการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยการนำเมทิลเอสเทอร์มาทำปฏิกิริยากับสารประกอบที่มีลักษณะเป็นกิ่ง 3 กิ่ง เมื่อพิจารณาพลังงานอิสระกิบส์ในการเกิดปฏิกิริยาของสารที่มีลักษณะคล้ายกันสารอื่น ได้แก่ Triacetin, Triolein เพิ่มเติม โดยสารตั้งต้นเป็นเมทิลเอสเทอร์กับกรีเซอร์อล พบว่า Triacetin มีค่าเป็นลบ และ Triolein มีค่าเป็นบวก ดังแสดงในตาราง 5.1 (ข้อมูลพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของ Triacetin และ Triolein นำมาจากหนังสือ Chemical Properties Handbook ของ Yaws (1999). และข้อมูลพื้นฐานของ ASPEN Plus) ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับพลังงานอิสระกิบส์ในการเกิดปฏิกิริยาของ TMP triacetate และ TMP trioleate (ข้อมูลพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารมาจากการประมาณด้วยวิธีของ Benson) พบว่ามีลักษณะเดียวกัน

ตารางที่ 5.1 พลังงานอิสระกิบส์ในการเกิดปฏิกิริยาของ Triacetin และ Triolein

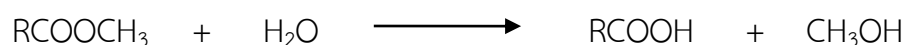
	Triacetin	Triolein
ΔG_r° (kJ/kmol)	-50260	13940

การสังเคราะห์สามารถเปรียบเทียบกับการทำปฏิกิริยาสะเทินของสารละลายเบสกับกรด เช่น โซเดียมไฮดรอกไซด์กับแอลกอฮอล์บางชนิด โดยเป็นเรื่องของสมดุลเคมี โดยปฏิกิริยาเป็นดังภาพที่ 5.19 เมื่อโซเดียมไฮดรอกไซด์อยู่ในรูปของสารละลายในของเหลวปฏิกิริยาจะเลือกที่จะอยู่ฝั่งซ้ายของสมการมากกว่า (Reusch, 2013) เช่นเดียวกับปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันในการสังเคราะห์ TMP esters จากเมทิลเอสเทอร์ ปฏิกิริยาจึงสามารถเกิดขึ้นได้น้อย



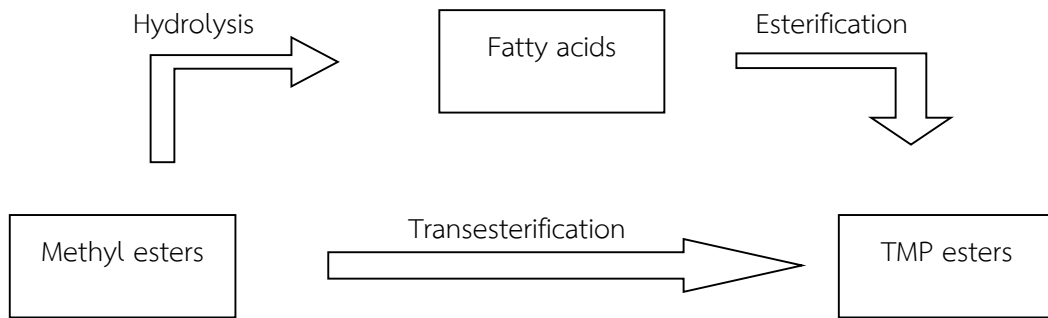
ภาพที่ 5.19 ปฏิกิริยาระหว่างแอลกอฮอล์กับโซเดียมไดออกไซด์

พิจารณาเกี่ยวกับความเป็นไปได้ของปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน จากข้อมูลของการทดลอง Yunus และคณะ กล่าวว่า การสังเคราะห์ TMP esters มีผลิตภัณฑ์ส่วนหนึ่งเป็นกรดไขมันอิสระ ประมาณ 2 - 5 เปอร์เซ็นต์ของผลิตภัณฑ์จากการทดลองหาปริมาณของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เหมาะสมในการสังเคราะห์ TMP esters เป็นไปได้ว่าการสังเคราะห์ที่มีบางส่วนเกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสเกิดขึ้นดังรูปที่ 5.20 Yunus และคณะกล่าวอีกว่ามีน้ำอยู่ในสารตั้งต้นด้วย แต่เมื่อพิจารณาภาวะที่ทำการทดลองแล้วไม่เหมาะสมที่จะทำให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสได้

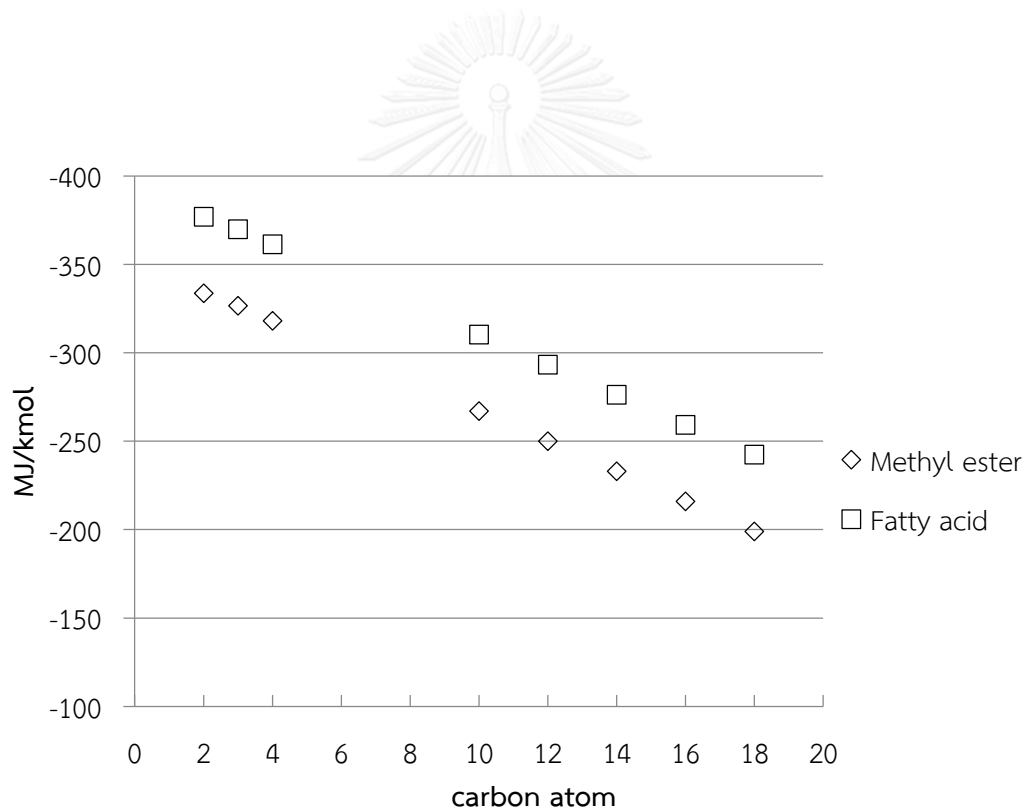


ภาพที่ 5.20 ปฏิกิริยาไฮโดรไลซิส

จึงมีแนวโน้มว่าตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสาเหตุหนึ่งที่ทำให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสเกิดขึ้น อันเป็นเหตุให้เมทิลเอสเทอร์เกิดปฏิกิริยากลายเป็นกรดไขมัน ซึ่งการทดลองการสังเคราะห์ TMP esters นี้ Yunus และคณะ ใช้ โซเดียมเมทอกไซด์ (Sodium methoxide) เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โซเดียมเมทอกไซด์มีส่วนช่วยให้เกิดปฏิกิริยาไฮโดรไลซิสขึ้น (Schuchardt, Sercheli & Vargas, 1998: 199-210) เมื่อเปรียบเทียบการทดลองกับการจำลองปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเกิดขึ้นได้ง่ายกว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน นอกจากนี้จากการที่ได้อธิบายไปในขั้นต้นเรื่องพลังงานอิสระกิบส์ในการเกิดปฏิกิริยาของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเกิดขึ้นได้ยากในการสังเคราะห์ TMP esters และเรื่องสมดุลของปฏิกิริยาเคมี จะเห็นได้ว่าปฏิกิริยาสามารถทำให้ TMP esters เป็น TMP และ เมทิลเอสเทอร์ได้ง่ายกว่า แต่เมื่อพิจารณาภาวะที่ทำการทดลอง เมทานอลซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ของการทดลองนี้ไม่สามารถอยู่ร่วมกับ TMP esters ได้ เนื่องจากการทดลองปฏิบัติที่สภาวะความดันต่ำ ในขณะที่ปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันมีลักษณะของปฏิกิริยาการสะเทินของกรดและด่างจึงเกิดได้ง่าย ดังนั้นอาจตั้งสมมติฐานได้ว่าการสังเคราะห์อาจมีปฏิกิริยา 2 ส่วน ทั้งปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันและปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันดำเนินไปพร้อมๆกัน โดยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันเป็นปฏิกิริยาดำเนินหลัก และปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเป็นปฏิกิริยาเสริม ดังรูปที่ 5.21 ซึ่งสามารถทำให้การทดลองดำเนินไปจนถึง Tri-esters ได้ พิจารณาเกี่ยวกับการจำลองปฏิกิริยาถึงสาเหตุของการที่การจำลองปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันถึงสามารถปฏิบัติได้เช่นเดียวกับการทดลอง เกิดจากโครงสร้างของกรดไขมันและเมทิลเอสเทอร์คล้ายกัน และมีแนวโน้มของการเพิ่มขึ้นของพลังงานอิสระกิบส์ไปในทิศทางเดียวกันดังรูปที่ 5.22



ภาพที่ 5.21 แผนผังปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างการสังเคราะห์ TMP esters



ภาพที่ 5.22 พลังงานอิสระกิบส์ของเมทิลเอสเทอร์และกรดไขมัน

บทที่ 6 สรุปผลการดำเนินการ

การจำลองการสังเคราะห์เอสเทอร์จากไตรเมทิลโพรเพนกับกรดไขมันจากน้ำมันปาล์มเป็นการจำลองกระบวนการการสังเคราะห์ TMP esters เพื่อศึกษาถึงกลไกของการสังเคราะห์ และนำมาเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ Yunus และคณะ (2003) ปัจจัยที่ศึกษาได้แก่ อุณหภูมิ และความดัน โดยทำการจำลองกระบวนการแบ่งเป็น 2 ปฏิกริยา คือ ปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน และ ปฏิกริยาเอสเทอร์ฟิเคชัน

6.1 สรุปผลการดำเนินการ

การจำลองปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันให้ผลลัพธ์ที่แตกต่างจากการทดลองของ Yunus และคณะ โดยผลิตภัณฑ์เกิดขึ้นน้อยมาก เกิดจากสมดุลเคมี และพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกริยามีค่าเป็นบวก ส่วนการจำลองกระบวนการสังเคราะห์ TMP esters โดยใช้ปฏิกริยาเอสเทอร์ฟิเคชันให้ผลลัพธ์ที่สอดคล้องกับการจำลองปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน โดยเฉพาะอย่างยิ่งการจำลองปรับความดัน เนื่องจากพลังงานอิสระกิบส์ของปฏิกริยามีค่าเป็นลบ ทำให้สามารถทำปฏิกริยากับ TMP ได้ง่าย นอกจากนี้จากผลการทดลอง มีกรดไขมันอยู่ในผลิตภัณฑ์ และตัวเร่งปฏิกริยาสามารถทำให้เมทิลเอสเทอร์เกิดปฏิกริยาไฮโดรไลซิสขึ้นกลายเป็นกรดไขมันได้ จึงตั้งสมมติฐานว่าในการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยเมทิลเอสเทอร์ เกิดทั้งปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันและปฏิกริยาเอสเทอร์ฟิเคชันขึ้น

6.2 ข้อเสนอแนะ

- 6.2.1 ศึกษาวิธีการประมาณอื่นๆ นอกเหนือจากที่มีในซอฟต์แวร์ ASPEN Plus หรือประมาณพารามิเตอร์อื่นๆ โดยใช้วิธีการประมาณที่หลากหลาย เพื่อให้เกิดความแม่นยำกับงานมากขึ้น
- 6.2.2 ทำการทดลองควบคู่กับการจำลองการสังเคราะห์ เพื่อให้สามารถสังเกตการเกิดปฏิกริยาการสังเคราะห์ได้
- 6.2.3 ทดลองการสังเคราะห์ TMP esters โดยใช้ปฏิกริยาเอสเทอร์ฟิเคชันเปรียบเทียบกับปฏิกริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน

6.3 ประโยชน์ที่ได้รับจากการดำเนินการ

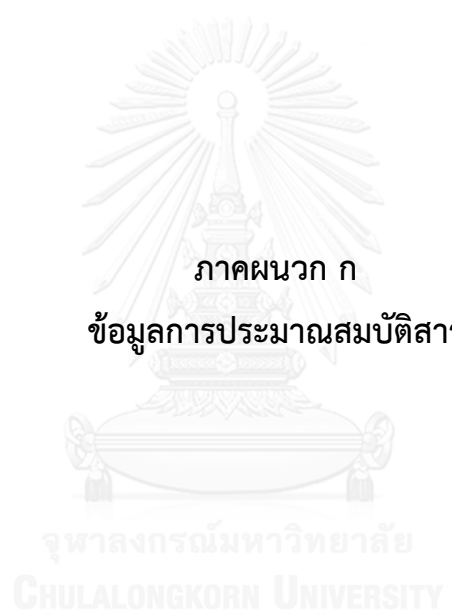
- 6.3.1 เข้าใจกลไกทางทฤษฎีของการสังเคราะห์ TMP esters มากขึ้น
- 6.3.2 สามารถประยุกต์ใช้ซอฟต์แวร์ซีมูเลเตอร์เพื่อการจำลองปฏิกิริยาเกี่ยวกับการสังเคราะห์สารหล่อลื่นได้
- 6.3.3 เป็นแนวทางสำหรับการทดลองและประยุกต์ใช้ซอฟต์แวร์ซีมูเลเตอร์สำหรับการนำไปผลิตสารหล่อลื่น
- 6.3.4 สารหล่อลื่น TMP esters สามารถสังเคราะห์ได้ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันได้ดีกว่าปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน



รายการอ้างอิง

- Krishna, K.S.V., Kabra, N., Kunchum, U. & Vijayakumar, T. (2014). Experimental investigation on usage of palm oil as a lubricant to substitute mineral oil in CI engines. *Chinese Journal of Engineering*, 1-5.
- Masjuki, H.H., Maleque, M.A., Kubo, A. & Nonaka, T. (1999). Palm oil and mineral oil based lubricants—their tribological and emission performance. *Tribology International*, 32, 305-314.
- Yunus, R., Fakhru'l-Razi, A., Ooi, T.L., Iyuke, S.E., & Perez, J.M. (2004). Lubrication properties of trimethylolpropane esters based on palm oil and palm kernel oils. *Eur. J. Lipid Sci. Technol*, 106, 52-60.
- Zulkifli, N.W.M., Kalam, M.A., Masjuki, H.H., Shahabuddin, M. and Yunus, R. (2013). Wear prevention characteristics of a palm oil-based TMP (trimethylolpropane) ester as an engine lubricant. *Energy*, 54, 167-173.
- Garcia, M., Gonzalo, A., Sanchez, J.L., Arauzo, J. & Pena, J.A. (2010). Prediction of normalized biodiesel properties by simulation of multiple feedstock blends. *Bioresource Technology*, 101, 4431-4439.
- Zhang, Y., Dube, M.A., McLean, D.D. & Kates, M. (2003). Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment. *Bioresource Technology*, 89, 1-16.
- Yunus, R., Fakhru'l-Razi, A., Ooi, T.L., Iyuke, S.E. and Idris, A. (2003). Development of optimum synthesis method for transesterification of palm oil methyl ester and trimethylolpropane to environmentally acceptable palm oil based-lubricant. *Journal of Oil Palm Research*, 15(2), 35-41.
- Chongkhong, S., Tongurai, C , Chetpattananondh, P., Bunyakan, C. (2007). Biodiesel production by esterification of palm fatty acid distillate. *Biomass and Bioenergy*, 31(8), 563-568.
- Honary, L. & Richter, E. (2011). Biobased Lubricants and Greases: Technology and Products. Markono Print Media Pte Ltd., Singapore, 1-8,103-124.

- Shell Lubricants. *Base oils*. Saim Lubricant. Online. Available from <http://siamlubricant.com/learning.html>, accessed 16 April 2015.
- Krzan, B. & Vizintin, J. (2004). Ester Based Lubricants Derived from Renewal Resources. *Tribology in industry*, 26, 58-62.
- Schaefer, T. G. *Ester In Synthetic Lubricants*. Bob is the oil guy. Online. Available from internet, <http://www.bobistheoilguy.com/esters-in-synthetic-lubricants/>, accessed 22 June 2015.
- Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell, J.P. (2001). *The Properties of Gases and Liquids*. (5th edition). The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Marrero, J., Gani, R. (2001). Group-contribution based estimation of pure component properties. *Fluid Phase Equilibria*. 183-184, 183-208.
- Green, D. W. & Perry, R. H. (2008). *Perry's Chemical Engineer Handbook*. (8th Edition). The McGraw-Hill Companies, Inc.
- Yaws, C. L. (1999). *Chemical Properties Handbook*. The McGraw-Hill Companies, Inc., New York.
- Reusch, W. (2013). *Alcohol Reactivity*. Online. Available from <http://www2.chemistry.msu.edu/faculty/reusch/VirtTxtJml/alcohol1.htm>, accessed 28 April 2015.
- Schuchardt, U., Sercheli, R. & Vargas, R. M. (1998). Transesterification of Vegetable Oils: a Review. *J. Braz. Chem. Soc.*, 9(1), 199-210.
- ศูนย์วิจัยปาล์มน้ำมันสุราษฎร์ธานี. *วิชาการปาล์มน้ำมัน*. กรมวิชาการเกษตร. ออนไลน์. สืบค้นจาก <http://www.doa.go.th/palm/index.html>, สืบค้นเมื่อ 3 ธันวาคม 2557.



ภาคผนวก ก

ข้อมูลการประมาณสมบัตินสาร

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

ตารางที่ ก. 1 ข้อมูลการประมาณจุดเดือดของกรดไขมัน (องศาเซลเซียส)

	Joback	Gani	Perry	ASPEN Plus
C2	117.52	116.2662	118.1	117.9
C3	140.4	142.5428	141.1	141.17
C4	163.28	165.8225	163.5	163.27
C5	186.16	186.7194	187	185.8
C6	209.04	205.6763	202	205.7
C7	231.92	223.0231	221	223
C8	254.8	239.0119	237.5	239.7
C9	277.68	253.84	253	255.6
C10	300.56	267.6646	268	270
C11	323.44	280.6129	-	284
C12	346.32	292.7895	-	298.7
C13	369.2	304.2812	-	312.1
C14	392.08	315.1609	-	326.2
C15	414.96	325.4905	-	337.5
C16	437.84	335.3231	-	350
C17	460.72	344.7042	-	361.5
C18	483.6	353.6735	-	374

ตารางที่ ก. 2 ข้อมูลการประมาณอุณหภูมิวิกฤติของกรดไขมัน (องศาเซลเซียส)

	Joback	Gani	Perry	ASPEN Plus
C2	314.1014	313.0202	318.8	318.8
C3	335.3607	336.3201	327.16	327.66
C4	356.3884	356.9615	342.55	342.55
C5	377.2617	375.4894	366.01	366.01
C6	398.0512	392.2967	387.05	387.05
C7	418.8223	407.676	404.15	404.15
C8	439.6357	421.851	421.11	421.11
C9	460.5492	434.9968	437.55	437.55
C10	481.6177	447.2527	448.95	448.95
C11	502.8944	458.7316	-	458.85
C12	524.4308	469.5262	-	469.85
C13	546.2782	479.7135	-	480.85
C14	568.4871	489.3582	-	489.85
C15	591.1086	498.5152	-	500.85
C16	614.1942	507.2314	-	511.85
C17	637.7965	515.5474	-	518.85
C18	661.9698	523.4983	-	529.85

ตารางที่ ก. 3 ข้อมูลการประมาณความดันวิกฤติของกรดไขมัน (bar)

	Joback	Gani	Perry	ASPEN Plus
C2	57.30524	59.08483	57.86	57.86
C3	49.80355	50.83208	46.68	46.68
C4	43.68397	44.23074	40.6	40.6
C5	38.62673	38.86789	36.3	36.3
C6	34.39943	34.45204	33.08	33.08
C7	30.82993	30.77266	30.43	30.43
C8	27.78852	27.67465	27.79	27.79
C9	25.17592	25.04168	25.14	25.14
C10	22.91517	22.78513	22.8	22.8
C11	20.94581	20.83652	-	20.9
C12	19.21983	19.14226	-	19.3
C13	17.69871	17.65994	-	17.9
C14	16.35128	16.35563	-	16.4
C15	15.15206	15.20192	-	15.7
C16	14.08009	14.1765	-	14.9
C17	13.11799	13.26102	-	13.7
C18	12.25123	12.44032	-	13.3

ตารางที่ ก. 4 ข้อมูลการประมาณปริมาตรวิกฤติของกรดไขมัน ($m^3/kmol$)

	Joback	Gani	Perry	ASPEN Plus
C2	0.1715	0.17257	0.177	0.177
C3	0.2275	0.22833	0.235	0.235
C4	0.2835	0.28409	0.293	0.293
C5	0.3395	0.33985	0.35	0.35
C6	0.3955	0.39561	0.408	0.408
C7	0.4515	0.45137	0.466	0.466
C8	0.5075	0.50713	0.523	0.523
C9	0.5635	0.56289	0.584	0.584
C10	0.6195	0.61865	0.639	0.639
C11	0.6755	0.67441	-	0.705
C12	0.7315	0.73017	-	0.767
C13	0.7875	0.78593	-	0.828
C14	0.8435	0.84169	-	0.89
C15	0.8995	0.89745	-	0.952
C16	0.9555	0.95321	-	1.015
C17	1.0115	1.00897	-	1.08
C18	1.0675	1.06473	-	1.14

ตารางที่ ก. 5 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของกรดไขมัน (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
C2	-434.88	-431.354	-432.5	-461.1	-432.8
C3	-455.52	-452.117	-454.18	-479.9	-453.5
C4	-476.16	-472.88	-474.11	-475.8	-475.8
C5	-496.8	-493.643	-494.04	-491.3	-490.1
C6	-517.44	-514.406	-513.97	-511.9	-511.9
C7	-538.08	-535.169	-533.9	-536.2	-536.2
C8	-558.72	-555.932	-553.83	-556	-556
C9	-579.36	-576.695	-573.76	-577.3	-577.3
C10	-600	-597.458	-593.69	-594.3	-594.3
C11	-620.64	-618.221	-613.62	-	-614.6
C12	-641.28	-638.984	-633.55	-	-640
C13	-661.92	-659.747	-653.48	-	-660.2
C14	-682.56	-680.51	-673.41	-	-683
C15	-703.2	-701.273	-693.34	-	-699
C16	-723.84	-722.036	-713.27	-	-723
C17	-744.48	-742.799	-733.2	-	-743
C18	-765.12	-763.562	-753.13	-	-764

ตารางที่ ก. 6 ข้อมูลการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของกรดไขมัน (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
C2	-377.95	-377.031	-372.297	-403	-374.6
C3	-369.53	-370.02	-364.066	-385	-366.7
C4	-361.11	-361.51	-355.835	-360	-360
C5	-352.69	-352.999	-347.604	-347	-345.6
C6	-344.27	-344.488	-339.373	-338	-338
C7	-335.85	-335.978	-331.142	-334	-334
C8	-327.43	-327.467	-322.911	-325	-325
C9	-319.01	-318.956	-314.68	-317	-317
C10	-310.59	-310.446	-306.449	-305	-305
C11	-302.17	-301.935	-298.218	-	-297
C12	-293.75	-293.424	-289.987	-	-293
C13	-285.33	-284.914	-281.756	-	-285
C14	-276.91	-276.403	-273.525	-	-278
C15	-268.49	-267.892	-265.294	-	-266
C16	-260.07	-259.382	-257.063	-	-260
C17	-251.65	-250.871	-248.832	-	-252
C18	-243.23	-242.361	-240.601	-	-244

ตารางที่ ก. 7 ข้อมูลการประมาณจุดเดือดของเมทิลเอสเทอร์ (องศาเซลเซียส)

	Joback	Gani	Perry	ASPEN Plus
C2	53.11	35.372	57.1	31.75
C3	75.99	62.74782	79.7	56.94
C4	98.87	96.27615	92.6	79.45
C5	121.75	125.0711	127.3	102.75
C6	144.63	150.3053	149.5	-
C7	167.51	172.7633	172	-
C8	190.39	192.9958	193	-
C10	236.15	228.2909	227	-

ตารางที่ ก. 8 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
C2	-422.53	-424.849	-411.991	-411.9	-411.9
C3	-443.17	-440.317	-433.671	-427.5	-427.5
C4	-463.81	-461.08	-453.601	-450.7	-450.7
C10	-587.65	-585.658	-573.181	-	-574.891
C12	-628.93	-627.184	-613.041	-	-617.4
C14	-670.21	-668.71	-652.901	-	-643.6
C16	-711.49	-710.236	-692.761	-	-700.7
C18	-752.77	-751.762	-732.621	-	-741.9

ตารางที่ ก. 9 ข้อมูลการประมาณพลังงานอิสระกิบส์ในการประกอบสารของเมทิลเอสเทอร์ (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
C2	-335.99	-341.474	-333.675	-324.2	-324.2
C3	-327.57	-322.076	-326.664	-311	-311
C4	-319.15	-313.845	-318.153	-305.3	-305.3
C10	-268.63	-264.459	-267.089	-	-256.272
C12	-251.79	-247.997	-250.068	-	-244.5
C14	-234.95	-231.535	-233.047	-	-219.887
C16	-218.11	-215.073	-216.025	-	-254
C18	-201.27	-198.611	-199.004	-	-242.2

ตารางที่ ก. 10 ข้อมูลการประมาณเอนทาลปีในการประกอบสารของสารต่างๆ (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
Ethyl acetate	-443.17	-445.612	-445.811	-444.5	-444.5
Ethyl propionate	-463.81	-461.08	-467.491	-463.6	-463.6
Ethyl butyrate	-484.45	-481.843	-487.421	-485.5	-485.5
Propyl acetate	-463.81	-466.375	-465.741	-464.8	-464.8
Butyl acetate	-484.45	-487.138	-485.671	-485.6	-485.6
Glycerol	-567.22	-581.878	-574	-	-577.9
Triacetin	-1186.21	-1211.48	-1207.06	-	-1252.7
Triolein	-1825.27	-1841.18	-1838.35	-	-1844
TMP	-632.61	-645.311	-637.81	-	-633.85

ตารางที่ ก. 11 ข้อมูลการประมาณพลังงานกอิสระกิบส์ในการประกอบสารของสารต่างๆ (MJ/kmol)

	Joback	Gani	Benson	Perry	ASPEN Plus
Ethyl acetate	-327.57	-333.243	-339.054	-328	-328
Ethyl propionate	-319.15	-313.845	-332.043	-319.3	-319.3
Ethyl butyrate	-310.73	-305.614	-323.533	-312.2	-312.2
Propyl acetate	-319.15	-325.012	-330.544	-320.4	-320.4
Butyl acetate	-310.73	-316.781	-322.033	-312.6	-312.6
Glycerol	-438.52	-453.445	-440.87	-	-447.1
Triacetin	-908.65	-940.574	-946.894	-	-983
Triolein	-263.83	-272.269	-312.621	-	-297
TMP	-407.98	-427.724	-414.999	-	-407.8

ตารางที่ ก. 12 ข้อมูลการประมาณสารที่ใช้ในการจำลองปฏิกิริยา

Component	TB (°C)	TC (°C)	PC (bar)	VC (m ³ /mol)	DHFORM (kJ/mol)	DGFORM (kJ/mol)
TMP	273.5	434.4	37.06	0.410	-637.8	-415.0
LAUR-M	258.4	388.5	16.52	0.784	-613.0	-250.1
MYRI-M	284.6	418.7	14.31	0.896	-652.9	-233.0
PALM-M	307.8	444.5	12.55	1.007	-692.8	-216.0
STEA-M	328.7	467.1	11.12	1.119	-732.6	-199.0
OLEA-M	325.6	465.1	10.89	1.108	-622.4	-122.3
LINO-M	324.1	464.6	10.88	1.095	-508.7	-43.4
LAUR-A	292.8	469.5	19.14	0.730	-633.6	-293.42
MYRI-A	315.2	489.4	16.36	0.842	-673.4	-276.40
PALM-A	335.3	507.2	14.18	0.953	-713.3	-259.38
STEA-A	353.7	523.5	12.44	1.065	-753.1	-242.36
OLEI-A	351.0	522.0	12.16	1.054	-642.9	-165.61
LINO-A	349.6	521.7	12.14	1.041	-529.2	-86.75
MNN	390.5	529.2	11.13	1.196	-1089.7	-483.0
PNN	404.7	543.6	9.96	1.308	-1129.6	-466.0

ตาราง ก. 12 (ต่อ)

Component	TB (°C)	TC (°C)	PC (bar)	VC (m ³ /mol)	DHFORM (kJ/mol)	DGFORM (kJ/mol)
SNN	417.9	557.1	8.99	1.419	-1169.5	-449.0
ONN	390.5	530.0	11.33	1.180	-1059.3	-372.2
LNN	414.9	555.6	8.82	1.395	-945.5	-293.4
MMN	464.5	591.0	5.84	1.982	-1541.7	-551.1
MPN	474.4	601.5	5.47	2.094	-1581.5	-534.1
MSN	483.9	611.3	5.14	2.205	-1621.4	-517.0
MON	482.5	610.4	5.08	2.195	-1511.2	-440.3
MLN	481.8	610.2	5.08	2.181	-1397.4	-361.4
PPN	483.9	611.3	5.14	2.205	-1621.4	-517.0
PSN	493.0	620.6	4.85	2.317	-1661.3	-500.0
PON	493.0	621.1	4.89	2.301	-1551.1	-423.3
PLN	491.0	619.6	4.80	2.293	-1437.3	-344.4
SSN	501.7	629.5	4.59	2.428	-1701.1	-483.0
SON	500.4	628.7	4.55	2.418	-1590.9	-406.3
SLN	499.7	628.5	4.54	2.404	-1477.2	-327.4
OON	501.7	630.5	4.67	2.396	-1480.7	-329.5
OLN	498.4	627.7	4.50	2.394	-1367.0	-250.6
LLN	497.7	627.5	4.50	2.381	-1253.2	-171.8
MMM	518.7	637.1	3.93	2.768	-1993.6	-619.1
MMP	526.3	645.2	3.76	2.880	-2033.5	-602.1
MMS	533.7	653.0	3.61	2.991	-2073.3	-585.1
MMO	532.6	652.3	3.59	2.981	-1963.1	-508.3
MML	532.1	652.1	3.59	2.967	-1849.4	-429.5
PPP	540.9	660.4	3.48	3.103	-2113.2	-568.1
PPS	547.8	667.6	3.35	3.214	-2153.0	-551.1
PPO	547.8	668.0	3.37	3.198	-2042.8	-474.3
PPL	546.2	666.8	3.33	3.190	-1929.1	-395.4
SSS	560.9	681.1	3.14	3.437	-2232.8	-517.0
SSO	560.0	680.5	3.12	3.427	-2122.6	-440.3
SSL	559.5	680.4	3.12	3.413	-2008.8	-361.4
OOO	560.9	682.2	3.18	3.389	-1902.2	-286.8

ตารางที่ ก. 12 (ต่อ)

Component	TB (°C)	TC (°C)	PC (bar)	VC (m ³ /mol)	DHFORM (kJ/mol)	DGFORM (kJ/mol)
OOL	557.5	679.1	3.08	3.392	-1788.4	-207.9
LLL	556.5	678.9	3.08	3.366	-1560.9	-50.2
MPP	533.7	653.0	3.61	2.991	-2073.3	-585.1
MPS	540.9	660.4	3.48	3.103	-2113.2	-568.1
MPO	539.8	659.8	3.45	3.092	-2003.0	-491.3
MPL	539.3	659.6	3.45	3.079	-1889.2	-412.5
MSS	547.8	667.6	3.35	3.214	-2153.0	-551.1
MSO	546.8	666.9	3.33	3.204	-2042.8	-474.3
MSL	546.2	666.8	3.33	3.190	-1929.1	-395.4
MOO	545.7	666.3	3.31	3.193	-1932.6	-397.5
MOL	545.2	666.1	3.31	3.180	-1818.9	-318.7
MLL	544.6	666.0	3.31	3.167	-1705.1	-239.8
PSS	554.5	674.5	3.24	3.326	-2192.9	-534.0
PSO	553.5	673.9	3.22	3.315	-2082.7	-457.3
PSL	553.0	673.7	3.22	3.302	-1969.0	-378.4
POO	554.5	675.2	3.27	3.293	-1972.5	-380.5
POL	551.9	673.1	3.20	3.291	-1858.8	-301.7
PLL	551.4	672.9	3.20	3.278	-1745.0	-222.8
SOO	559.0	679.9	3.10	3.416	-2012.4	-363.5
SOL	558.5	679.8	3.10	3.403	-1898.6	-284.6
SLL	558.0	679.6	3.10	3.390	-1784.9	-205.8
OLL	557.0	679.0	3.08	3.379	-1674.7	-129.0
RNN	375.3	513.4	12.56	1.085	-1049.9	-500.1
RRN	443.0	568.2	6.76	1.759	-1462.0	-585.1
RMN	454.0	580.0	6.27	1.871	-1501.8	-568.1
RPN	464.5	591.0	5.84	1.982	-1541.7	-551.1
RSN	474.4	601.5	5.47	2.094	-1581.5	-534.1
RON	472.9	600.5	5.41	2.083	-1471.3	-457.3
RLN	472.2	600.3	5.40	2.070	-1357.6	-378.5
RRR	493.7	610.3	4.53	2.434	-1874.0	-670.2
RRM	502.4	619.7	4.31	2.545	-1913.9	-653.2

ตารางที่ ก. 12 (ต่อ)

Component	TB (°C)	TC (°C)	PC (bar)	VC (m ³ /mol)	DHFORM (kJ/mol)	DGFORM (kJ/mol)
RRP	510.7	628.6	4.11	2.657	-1953.7	-636.2
RRS	518.7	637.1	3.93	2.768	-1993.6	-619.1
RRO	517.5	636.3	3.89	2.758	-1883.4	-542.4
RRL	516.8	636.1	3.89	2.744	-1769.7	-463.5
RMM	510.7	628.6	4.11	2.657	-1953.7	-636.2
RMP	518.7	637.1	3.93	2.768	-1993.6	-619.1
RMS	526.3	645.2	3.76	2.880	-2033.5	-602.1
RMO	525.2	644.5	3.73	2.869	-1923.3	-525.4
RML	524.6	644.3	3.73	2.856	-1809.5	-446.5
RPP	526.3	645.2	3.76	2.880	-2033.5	-602.1
RPS	533.7	653.0	3.61	2.991	-2073.3	-585.1
RPO	532.6	652.3	3.59	2.981	-1963.1	-508.3
RPL	532.1	652.1	3.59	2.967	-1849.4	-429.5
RSS	540.9	660.4	3.48	3.103	-2113.2	-568.1
RSO	539.8	659.8	3.45	3.092	-2003.0	-491.3
RSL	539.3	659.6	3.45	3.079	-1889.2	-412.5
ROO	538.7	659.1	3.43	3.082	-1892.8	-414.6
ROL	538.2	658.9	3.43	3.068	-1779.0	-335.7
RLL	537.6	658.8	3.43	3.055	-1665.3	-256.9



ตารางที่ ข. 1 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 80 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	1.257	9784.901
METHANOL		789.032	81.443
LAUR-M	1002.225	2.701	806.761
MYRI-M	1670.375	2.34	1469.301
PALM-M	46213.7	37.305	42581.01
STEA-M	3006.675	1.539	2844.673
OLEA-M	45211.48	30.622	42482.9
LINO-M	13251.64	10.342	12500.24
RNN		0.007	282.145
MNN		0.006	280.591
PNN		0.095	4912.602
SNN		0.004	214.408
ONN		0.076	3600.639
LNN		0.026	992.771
RRN		trace	0.195
RMN		trace	0.149
RPN		< 0.001	2.096
RSN		trace	0.076
RON		< 0.001	1.232
RLN		trace	0.382
MMN		trace	0.112
MPN		< 0.001	1.558
MSN		trace	0.056
MON		< 0.001	0.914
MLN		trace	0.285
PPN		< 0.001	21.361
PSN		< 0.001	0.759
PON		< 0.001	15.626
PLN		< 0.001	3.922
SSN		trace	0.027
SON		trace	0.446

ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		trace	0.14
OON		< 0.001	11.356
OLN		< 0.001	2.339
LLN		< 0.001	0.736
MMM		trace	< 0.001
MMP		trace	< 0.001
MMS		trace	trace
MMO		trace	< 0.001
MML		trace	< 0.001
PPP		trace	0.036
PPS		trace	0.001
PPO		trace	0.025
PPL		trace	0.007
SSS		trace	trace
SSO		trace	< 0.001
SSL		trace	trace
OOO		trace	0.012
OOL		trace	0.002
LLL		trace	< 0.001
MPP		trace	0.003
MPS		trace	< 0.001
MPO		trace	0.002
MPL		trace	0.001
MSS		trace	trace
MSO		trace	< 0.001
MSL		trace	< 0.001
MOO		trace	0.001
MOL		trace	< 0.001
MLL		trace	< 0.001
PSS		trace	< 0.001
PSO		trace	0.001
PSL		trace	< 0.001

ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		trace	0.017
POL		trace	0.004
PLL		trace	0.001
SOO		trace	< 0.001
SOL		trace	< 0.001
SLL		trace	< 0.001
OLL		trace	0.001
RRR		trace	< 0.001
RRM		trace	< 0.001
RRP		trace	< 0.001
RRS		trace	< 0.001
RRO		trace	< 0.001
RRL		trace	< 0.001
RMM		trace	< 0.001
RMP		trace	< 0.001
RMS		trace	< 0.001
RMO		trace	< 0.001
RML		trace	< 0.001
RPP		trace	0.004
RPS		trace	< 0.001
RPO		trace	0.002
RPL		trace	0.001
RSS		trace	trace
RSO		trace	< 0.001
RSL		trace	< 0.001
ROO		trace	0.001
ROL		trace	< 0.001
RLL		trace	< 0.001

ตารางที่ ข. 2 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 100 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	9.244	5658.903
METHANOL		1838.979	37.553
LAUR-M	1002.225	17.897	633.609
MYRI-M	1670.375	16.964	1252.489
PALM-M	46213.7	285.311	38098.51
STEA-M	3006.675	12.181	2629.335
OLEA-M	45211.48	235.174	39216.09
LINO-M	13251.64	78.103	11503.11
RNN		0.143	501.792
MNN		0.131	556.083
PNN		2.128	10466.72
SNN		0.089	482.064
ONN		1.712	7526.738
LNN		0.569	2206.071
RRN		< 0.001	1.036
RMN		< 0.001	0.89
RPN		0.002	13.525
RSN		< 0.001	0.52
RON		0.001	8.331
RLN		< 0.001	2.559
MMN		< 0.001	0.752
MPN		0.001	11.267
MSN		< 0.001	0.428
MON		0.001	6.919
MLN		< 0.001	2.135
PPN		0.022	166.837
PSN		0.001	6.278
PON		0.017	124.995
PLN		0.006	31.696
SSN		< 0.001	0.234
SON		0.001	3.847

ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		< 0.001	1.197
OON		0.013	92.963
OLN		0.004	19.694
LLN		0.001	6.131
MMM		trace	< 0.001
MMP		trace	0.005
MMS		trace	< 0.001
MMO		trace	0.003
MML		trace	0.001
PPP		< 0.001	1.031
PPS		trace	0.037
PPO		< 0.001	0.73
PPL		< 0.001	0.198
SSS		trace	< 0.001
SSO		trace	0.001
SSL		trace	< 0.001
OOO		< 0.001	0.367
OOL		< 0.001	0.077
LLL		trace	0.008
MPP		< 0.001	0.074
MPS		trace	0.003
MPO		trace	0.045
MPL		trace	0.014
MSS		trace	< 0.001
MSO		trace	0.002
MSL		trace	0.001
MOO		trace	0.027
MOL		trace	0.009
MLL		trace	0.003
PSS		trace	0.001
PSO		trace	0.023
PSL		trace	0.007

ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		< 0.001	0.518
POL		< 0.001	0.123
PLL		< 0.001	0.039
SOO		trace	0.014
SOL		trace	0.004
SLL		trace	0.001
OLL		trace	0.024
RRR		trace	0.001
RRM		trace	0.001
RRP		trace	0.009
RRS		trace	< 0.001
RRO		trace	0.005
RRL		trace	0.002
RMM		trace	< 0.001
RMP		trace	0.007
RMS		trace	< 0.001
RMO		trace	0.004
RML		trace	0.001
RPP		< 0.001	0.095
RPS		trace	0.003
RPO		< 0.001	0.057
RPL		trace	0.018
RSS		trace	< 0.001
RSO		trace	0.002
RSL		trace	0.001
ROO		trace	0.035
ROL		trace	0.011
RLL		trace	0.003

ตารางที่ ข. 3 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	27.898	2362.123
METHANOL		2739.931	17.591
LAUR-M	1002.225	70.502	491.696
MYRI-M	1670.375	72.687	1049.616
PALM-M	46213.7	1282.906	33357.52
STEA-M	3006.675	57.055	2394.475
OLEA-M	45211.48	1072.336	35676.24
LINO-M	13251.64	349.084	10384.62
RNN		1.072	586.012
MNN		1.064	718.074
PNN		18.203	14428.28
SNN		0.789	704.515
ONN		14.849	10304.6
LNN		4.842	3175.14
RRN		0.002	3.344
RMN		0.002	3.198
RPN		0.035	52.16
RSN		0.002	2.135
RON		0.028	33.87
RLN		0.009	10.272
MMN		0.002	3.006
MPN		0.034	48.306
MSN		0.001	1.953
MON		0.027	31.222
MLN		0.009	9.508
PPN		0.563	766.662
PSN		0.024	30.671
PON		0.448	592.869
PLN		0.146	150.983
SSN		0.001	1.216
SON		0.019	19.723

ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.006	6.049
OON		0.355	454.829
OLN		0.116	98.32
LLN		0.038	30.182
MMM		trace	0.005
MMP		< 0.001	0.072
MMS		trace	0.003
MMO		< 0.001	0.045
MML		< 0.001	0.014
PPP		0.015	15.904
PPS		0.001	0.604
PPO		0.012	11.606
PPL		0.004	3.145
SSS		trace	0.001
SSO		< 0.001	0.015
SSL		trace	0.005
OOO		0.007	6.182
OOL		0.002	1.318
LLL		< 0.001	0.129
MPP		0.001	1.067
MPS		< 0.001	0.041
MPO		0.001	0.675
MPL		< 0.001	0.209
MSS		trace	0.002
MSO		< 0.001	0.026
MSL		trace	0.008
MOO		0.001	0.432
MOL		< 0.001	0.134
MLL		< 0.001	0.042
PSS		< 0.001	0.023
PSO		< 0.001	0.386
PSL		< 0.001	0.12

ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		0.009	8.47
POL		0.003	2.026
PLL		0.001	0.632
SOO		< 0.001	0.249
SOL		< 0.001	0.078
SLL		< 0.001	0.024
OLL		0.001	0.412
RRR		trace	0.007
RRM		trace	0.006
RRP		< 0.001	0.096
RRS		trace	0.004
RRO		< 0.001	0.06
RRL		< 0.001	0.019
RMM		trace	0.006
RMP		< 0.001	0.083
RMS		trace	0.003
RMO		< 0.001	0.052
RML		< 0.001	0.016
RPP		0.001	1.241
RPS		< 0.001	0.047
RPO		0.001	0.782
RPL		< 0.001	0.242
RSS		trace	0.002
RSO		< 0.001	0.03
RSL		< 0.001	0.009
ROO		0.001	0.498
ROL		< 0.001	0.155
RLL		< 0.001	0.048

ตารางที่ ข. 4 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	40.257	1379.737
METHANOL		3096.541	11.733
LAUR-M	1002.225	127.215	420.94
MYRI-M	1670.375	137.96	942.023
PALM-M	46213.7	2497.64	30646.38
STEA-M	3006.675	114.331	2262.743
OLEA-M	45211.48	2110.233	33505.58
LINO-M	13251.64	681.284	9727.428
RNN		2.4	558.352
MNN		2.505	725.151
PNN		43.961	15064.46
SNN		1.961	763.329
ONN		36.248	10770.8
LNN		11.723	3399.744
RRN		0.008	5.192
RMN		0.008	5.28
RPN		0.137	89.255
RSN		0.006	3.799
RON		0.11	59.643
RLN		0.036	17.998
MMN		0.008	5.275
MPN		0.138	87.831
MSN		0.006	3.69
MON		0.111	58.377
MLN		0.036	17.685
PPN		2.344	1443.875
PSN		0.102	60.019
PON		1.884	1137.91
PLN		0.61	290.638
SSN		0.004	2.472
SON		0.082	39.636

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.026	12.09
OON		1.511	889.38
OLN		0.49	194.25
LLN		0.159	59.298
MMM		< 0.001	0.015
MMP		< 0.001	0.228
MMS		< 0.001	0.009
MMO		< 0.001	0.147
MML		< 0.001	0.045
PPP		0.106	54.204
PPS		0.005	2.135
PPO		0.084	40.277
PPL		0.027	10.912
SSS		trace	0.003
SSO		< 0.001	0.055
SSL		< 0.001	0.017
OOO		0.053	22.222
OOL		0.017	4.786
LLL		0.002	0.461
MPP		0.006	3.514
MPS		< 0.001	0.139
MPO		0.005	2.281
MPL		0.002	0.703
MSS		< 0.001	0.005
MSO		< 0.001	0.09
MSL		< 0.001	0.028
MOO		0.004	1.495
MOL		0.001	0.462
MLL		< 0.001	0.143
PSS		< 0.001	0.084
PSO		0.004	1.397
PSL		0.001	0.433

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		0.067	29.92
POL		0.022	7.196
PLL		0.007	2.229
SOO		0.003	0.922
SOL		0.001	0.286
SLL		< 0.001	0.089
OLL		0.006	1.486
RRR		< 0.001	0.019
RRM		< 0.001	0.017
RRP		< 0.001	0.272
RRS		< 0.001	0.011
RRO		< 0.001	0.175
RRL		< 0.001	0.053
RMM		< 0.001	0.016
RMP		< 0.001	0.249
RMS		< 0.001	0.01
RMO		< 0.001	0.16
RML		< 0.001	0.049
RPP		0.006	3.851
RPS		< 0.001	0.152
RPO		0.005	2.49
RPL		0.002	0.766
RSS		< 0.001	0.006
RSO		< 0.001	0.099
RSL		< 0.001	0.03
ROO		0.004	1.626
ROL		0.001	0.501
RLL		< 0.001	0.155

ตารางที่ ข. 5 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 140 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	55.842	750.789
METHANOL		3461.449	7.351
LAUR-M	1002.225	220.963	332.591
MYRI-M	1670.375	257.36	796.854
PALM-M	46213.7	4828.117	26811.01
STEA-M	3006.675	231.585	2072.939
OLEA-M	45211.48	4155.151	30179.46
LINO-M	13251.64	1335.009	8766.849
RNN		5.033	480.417
MNN		5.643	674.975
PNN		102.607	14640.15
SNN		4.795	783.389
ONN		86.18	10564.88
LNN		27.737	3422.547
RRN		0.026	7.076
RMN		0.028	7.81
RPN		0.496	138.174
RSN		0.023	6.221
RON		0.408	95.672
RLN		0.131	28.82
MMN		0.03	8.464
MPN		0.537	147.445
MSN		0.024	6.552
MON		0.44	101.472
MLN		0.142	30.681
PPN		9.463	2535.187
PSN		0.43	111.423
PON		7.746	2051.087
PLN		2.498	526.95
SSN		0.02	4.852
SON		0.351	76.092

ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.113	23.158
OON		6.329	1645.253
OLN		2.041	363.995
LLN		0.658	110.865
MMM		< 0.001	0.041
MMP		0.002	0.663
MMS		< 0.001	0.028
MMO		0.002	0.443
MML		0.001	0.136
PPP		0.74	172.478
PPS		0.033	7.176
PPO		0.599	131.462
PPL		0.193	35.72
SSS		< 0.001	0.012
SSO		0.001	0.202
SSL		< 0.001	0.062
OOO		0.391	76.242
OOL		0.126	16.631
LLL		0.013	1.594
MPP		0.043	10.704
MPS		0.002	0.446
MPO		0.034	7.17
MPL		0.011	2.204
MSS		< 0.001	0.019
MSO		0.002	0.3
MSL		< 0.001	0.092
MOO		0.028	4.846
MOL		0.009	1.494
MLL		0.003	0.46
PSS		0.001	0.298
PSO		0.027	4.84
PSL		0.009	1.494

ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		0.484	100.139
POL		0.156	24.276
PLL		0.05	7.498
SOO		0.022	3.293
SOL		0.007	1.019
SLL		0.002	0.315
OLL		0.041	5.148
RRR		< 0.001	0.041
RRM		< 0.001	0.041
RRP		0.002	0.674
RRS		< 0.001	0.028
RRO		0.002	0.448
RRL		0.001	0.137
RMM		< 0.001	0.041
RMP		0.002	0.67
RMS		< 0.001	0.028
RMO		0.002	0.446
RML		0.001	0.136
RPP		0.04	10.828
RPS		0.002	0.452
RPO		0.032	7.23
RPL		0.01	2.218
RSS		< 0.001	0.019
RSO		0.001	0.303
RSL		< 0.001	0.093
ROO		0.026	4.872
ROL		0.008	1.499
RLL		0.003	0.461

ตารางที่ ข. 6 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 500 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536		10977.39
METHANOL			584.147
LAUR-M	1002.225		875.813
MYRI-M	1670.375		1536.81
PALM-M	46213.7		43708.56
STEA-M	3006.675		2890.253
OLEA-M	45211.48		43539.36
LINO-M	13251.64		12722.31
RNN			185.648
MNN			189.051
PNN			3433.467
SNN			155.813
ONN			2236.685
LNN			710.569
RRN			0.072
RMN			0.058
RPN			0.85
RSN			0.032
RON			0.518
RLN			0.157
MMN			0.045
MPN			0.656
MSN			0.025
MON			0.397
MLN			0.121
PPN			9.427
PSN			0.351
PON			6.769
PLN			1.74
SSN			0.013
SON			0.211

ตารางที่ ข.6 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN			0.065
OON			4.821
OLN			1.06
LLN			0.326
MMM			trace
MMP			< 0.001
MMS			trace
MMO			< 0.001
MML			< 0.001
PPP			0.01
PPS			< 0.001
PPO			0.007
PPL			0.002
SSS			trace
SSO			trace
SSL			trace
OOO			0.003
OOL			0.001
LLL			< 0.001
MPP			0.001
MPS			< 0.001
MPO			< 0.001
MPL			< 0.001
MSS			trace
MSO			< 0.001
MSL			trace
MOO			< 0.001
MOL			< 0.001
MLL			< 0.001
PSS			< 0.001
PSO			< 0.001
PSL			< 0.001

ตารางที่ ข.6 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO			0.005
POL			0.001
PLL			< 0.001
SOO			< 0.001
SOL			< 0.001
SLL			< 0.001
OLL			< 0.001
RRR			< 0.001
RRM			trace
RRP			< 0.001
RRS			trace
RRO			< 0.001
RRL			< 0.001
RMM			trace
RMP			< 0.001
RMS			trace
RMO			< 0.001
RML			< 0.001
RPP			0.001
RPS			< 0.001
RPO			0.001
RPL			< 0.001
RSS			trace
RSO			< 0.001
RSL			trace
ROO			< 0.001
ROL			< 0.001
RLL			< 0.001

ตารางที่ ข. 7 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ิฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 100 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	5.987	7820.841
METHANOL		1175.706	169.78
LAUR-M	1002.225	5.818	733.739
MYRI-M	1670.375	5.266	1370.454
PALM-M	46213.7	86.368	40388.53
STEA-M	3006.675	3.622	2731.642
OLEA-M	45211.48	68.117	41218.85
LINO-M	13251.64	22.047	11997.06
RNN		0.043	381.254
MNN		0.037	413.254
PNN		0.595	7777.109
SNN		0.024	360.982
ONN		0.458	5190.539
LNN		0.149	1642.513
RRN		< 0.001	0.427
RMN		< 0.001	0.362
RPN		< 0.001	5.551
RSN		trace	0.216
RON		< 0.001	3.462
RLN		< 0.001	1.047
MMN		< 0.001	0.302
MPN		< 0.001	4.559
MSN		trace	0.175
MON		< 0.001	2.828
MLN		< 0.001	0.859
PPN		0.003	67.889
PSN		< 0.001	2.585
PON		0.002	49.944
PLN		0.001	12.789
SSN		trace	0.098
SON		< 0.001	1.594

ตารางที่ ข.7 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		< 0.001	0.487
OON		0.002	36.438
OLN		0.001	7.979
LLN		< 0.001	2.442
MMM		trace	< 0.001
MMP		trace	0.001
MMS		trace	< 0.001
MMO		trace	0.001
MML		trace	< 0.001
PPP		< 0.001	0.232
PPS		trace	0.008
PPO		trace	0.161
PPL		trace	0.044
SSS		trace	< 0.001
SSO		trace	< 0.001
SSL		trace	< 0.001
OOO		trace	0.077
OOL		trace	0.017
LLL		trace	0.002
MPP		trace	0.017
MPS		trace	0.001
MPO		trace	0.01
MPL		trace	0.003
MSS		trace	< 0.001
MSO		trace	< 0.001
MSL		trace	< 0.001
MOO		trace	0.006
MOL		trace	0.002
MLL		trace	0.001
PSS		trace	< 0.001
PSO		trace	0.005
PSL		trace	0.002

ตารางที่ ข.7 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		trace	0.112
POL		trace	0.027
PLL		trace	0.008
SOO		trace	0.003
SOL		trace	0.001
SLL		trace	< 0.001
OLL		trace	0.005
RRR		trace	< 0.001
RRM		trace	< 0.001
RRP		trace	0.002
RRS		trace	< 0.001
RRO		trace	0.001
RRL		trace	< 0.001
RMM		trace	< 0.001
RMP		trace	0.002
RMS		trace	< 0.001
RMO		trace	0.001
RML		trace	< 0.001
RPP		trace	0.022
RPS		trace	0.001
RPO		trace	0.013
RPL		trace	0.004
RSS		trace	< 0.001
RSO		trace	< 0.001
RSL		trace	< 0.001
ROO		trace	0.008
ROL		trace	0.002
RLL		trace	0.001

ตารางที่ ข. 8 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 50 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	14.094	5463.193
METHANOL		1846.7	79.136
LAUR-M	1002.225	17.031	637.337
MYRI-M	1670.375	16.147	1246.964
PALM-M	46213.7	272.141	37765.07
STEA-M	3006.675	11.633	2603.732
OLEA-M	45211.48	218.809	39291.5
LINO-M	13251.64	70.633	11405.78
RNN		0.189	496.294
MNN		0.172	563.512
PNN		2.812	10898.01
SNN		0.117	515.65
ONN		2.207	7415.011
LNN		0.714	2340.214
RRN		< 0.001	1.036
RMN		< 0.001	0.921
RPN		0.002	14.495
RSN		< 0.001	0.576
RON		0.002	9.217
RLN		< 0.001	2.781
MMN		< 0.001	0.804
MPN		0.002	12.47
MSN		< 0.001	0.489
MON		0.001	7.887
MLN		< 0.001	2.389
PPN		0.027	190.839
PSN		0.001	7.408
PON		0.021	143.125
PLN		0.007	36.551
SSN		< 0.001	0.285
SON		0.001	4.655

ตารางที่ ข.8 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		< 0.001	1.42
OON		0.016	106.455
OLN		0.005	23.248
LLN		0.002	7.096
MMM		trace	< 0.001
MMP		trace	0.006
MMS		trace	< 0.001
MMO		trace	0.004
MML		trace	0.001
PPP		< 0.001	1.309
PPS		trace	0.048
PPO		< 0.001	0.926
PPL		< 0.001	0.251
SSS		trace	< 0.001
SSO		trace	0.001
SSL		trace	< 0.001
OOO		< 0.001	0.462
OOL		< 0.001	0.1
LLL		trace	0.01
MPP		< 0.001	0.091
MPS		trace	0.003
MPO		< 0.001	0.056
MPL		trace	0.017
MSS		trace	< 0.001
MSO		trace	0.002
MSL		trace	0.001
MOO		trace	0.035
MOL		trace	0.011
MLL		trace	0.003
PSS		trace	0.002
PSO		trace	0.03
PSL		trace	0.009

ตารางที่ ข.8 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		< 0.001	0.654
POL		< 0.001	0.157
PLL		< 0.001	0.049
SOO		trace	0.019
SOL		trace	0.006
SLL		trace	0.002
OLL		< 0.001	0.031
RRR		trace	0.001
RRM		trace	0.001
RRP		trace	0.01
RRS		trace	< 0.001
RRO		trace	0.006
RRL		trace	0.002
RMM		trace	0.001
RMP		trace	0.008
RMS		trace	< 0.001
RMO		trace	0.005
RML		trace	0.001
RPP		< 0.001	0.114
RPS		trace	0.004
RPO		< 0.001	0.07
RPL		trace	0.022
RSS		trace	< 0.001
RSO		trace	0.003
RSL		trace	0.001
ROO		trace	0.044
ROL		trace	0.013
RLL		trace	0.004

ตารางที่ ข. 9 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	40.257	1379.737
METHANOL		3096.541	11.733
LAUR-M	1002.225	127.215	420.94
MYRI-M	1670.375	137.96	942.023
PALM-M	46213.7	2497.64	30646.38
STEA-M	3006.675	114.331	2262.743
OLEA-M	45211.48	2110.233	33505.58
LINO-M	13251.64	681.284	9727.428
RNN		2.4	558.352
MNN		2.505	725.151
PNN		43.961	15064.46
SNN		1.961	763.329
ONN		36.248	10770.8
LNN		11.723	3399.744
RRN		0.008	5.192
RMN		0.008	5.28
RPN		0.137	89.255
RSN		0.006	3.799
RON		0.11	59.643
RLN		0.036	17.998
MMN		0.008	5.275
MPN		0.138	87.831
MSN		0.006	3.69
MON		0.111	58.377
MLN		0.036	17.685
PPN		2.344	1443.875
PSN		0.102	60.019
PON		1.884	1137.91
PLN		0.61	290.638
SSN		0.004	2.472
SON		0.082	39.636

ตารางที่ ข.9 (ต่อ)

SLN		0.026	12.09
OON		1.511	889.38
OLN		0.49	194.25
LLN		0.159	59.298
MMM		< 0.001	0.015
MMP		< 0.001	0.228
MMS		< 0.001	0.009
MMO		< 0.001	0.147
MML		< 0.001	0.045
PPP		0.106	54.204
PPS		0.005	2.135
PPO		0.084	40.277
PPL		0.027	10.912
SSS		trace	0.003
SSO		< 0.001	0.055
SSL		< 0.001	0.017
OOO		0.053	22.222
OOL		0.017	4.786
LLL		0.002	0.461
MPP		0.006	3.514
MPS		< 0.001	0.139
MPO		0.005	2.281
MPL		0.002	0.703
MSS		< 0.001	0.005
MSO		< 0.001	0.09
MSL		< 0.001	0.028
MOO		0.004	1.495
MOL		0.001	0.462
MLL		< 0.001	0.143
PSS		< 0.001	0.084
PSO		0.004	1.397
PSL		0.001	0.433
POO		0.067	29.92

ตารางที่ ข.9 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POL		0.022	7.196
PLL		0.007	2.229
SOO		0.003	0.922
SOL		0.001	0.286
SLL		< 0.001	0.089
OLL		0.006	1.486
RRR		< 0.001	0.019
RRM		< 0.001	0.017
RRP		< 0.001	0.272
RRS		< 0.001	0.011
RRO		< 0.001	0.175
RRL		< 0.001	0.053
RMM		< 0.001	0.016
RMP		< 0.001	0.249
RMS		< 0.001	0.01
RMO		< 0.001	0.16
RML		< 0.001	0.049
RPP		0.006	3.851
RPS		< 0.001	0.152
RPO		0.005	2.49
RPL		0.002	0.766
RSS		< 0.001	0.006
RSO		< 0.001	0.099
RSL		< 0.001	0.03
ROO		0.004	1.626
ROL		0.001	0.501
RLL		< 0.001	0.155

ตารางที่ ข. 10 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ฟิเคชัน ที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 0.1 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.536	1014.512	
METHANOL		4353.996	
LAUR-M	1002.225	695.747	
MYRI-M	1670.375	1158.407	
PALM-M	46213.7	29668.8	
STEA-M	3006.675	2082.103	
OLEA-M	45211.48	29280.01	
LINO-M	13251.64	9029.687	
RNN		235.23	
MNN		377.027	
PNN		9359.388	
SNN		639.904	
ONN		9014.385	
LNN		2784.83	
RRN		3.013	
RMN		4.686	
RPN		113.297	
RSN		7.568	
RON		106.779	
RLN		33.04	
MMN		7.267	
MPN		175.239	
MSN		11.678	
MON		164.801	
MLN		51.002	
PPN		4216.21	
PSN		280.388	
PON		3957.294	
PLN		1224.859	
SSN		18.61	
SON		262.697	

ตารางที่ ข.10 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		81.321	
OON		3708.073	
OLN		1147.864	
LLN		355.327	
MMM		0.12	
MMP		2.854	
MMS		0.188	
MMO		2.653	
MML		0.822	
PPP		1610.132	
PPS		105.758	
PPO		1493.917	
PPL		462.796	
SSS		0.455	
SSO		6.427	
SSL		1.991	
OOO		1282.7	
OOL		397.415	
LLL		38.148	
MPP		67.826	
MPS		4.46	
MPO		62.995	
MPL		19.513	
MSS		0.293	
MSO		4.138	
MSL		1.282	
MOO		58.452	
MOL		18.108	
MLL		5.609	
PSS		6.939	
PSO		98.031	
PSL		30.371	

ตารางที่ ข.10 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		1384.864	
POL		429.041	
PLL		132.92	
SOO		90.794	
SOL		28.131	
SLL		8.716	
OLL		123.129	
RRR		0.033	
RRM		0.051	
RRP		1.223	
RRS		0.081	
RRO		1.14	
RRL		0.353	
RMM		0.078	
RMP		1.87	
RMS		0.123	
RMO		1.741	
RML		0.539	
RPP		44.495	
RPS		2.929	
RPO		41.37	
RPL		12.814	
RSS		0.193	
RSO		2.721	
RSL		0.843	
ROO		38.426	
ROL		11.903	
RLL		3.687	

ตารางที่ ข. 11 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 80 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.042	3.456
WATER		4599.702	87.921
LAUR-A	952.367	6.706	137.104
MYRI-A	1587.278	10.618	417.015
PALM-A	43914.691	177.508	11870.091
STEA-A	2857.1	14.896	1536.223
OLEI-A	42962.324	189.313	14985.732
LINO-A	12592.405	82.271	5820.95
RNN		0.013	23.872
MNN		0.019	43.042
PNN		0.311	785.064
SNN		0.025	69.329
ONN		0.323	744.015
LNN		0.141	264.053
RRN		0.003	12.367
RMN		0.004	17.146
RPN		0.06	250.89
RSN		0.005	18.408
RON		0.061	190.585
RLN		0.027	76.037
MMN		0.006	23.403
MPN		0.088	337.991
MSN		0.007	24.53
MON		0.089	256.428
MLN		0.039	102.821
PPN		1.376	4828.375
PSN		0.109	347.301
PON		1.389	4567.161
PLN		0.606	1475.563
SSN		0.009	24.799
SON		0.11	263.768

ตารางที่ ข.11 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.048	106.693
OON		1.399	4291.725
OLN		0.611	1138.012
LLN		0.266	460.78
MMM		0.001	4.664
MMP		0.022	62.81
MMS		0.002	4.301
MMO		0.022	47.04
MML		0.009	19.225
PPP		5.15	11423.3
PPS		0.402	784.197
PPO		5.139	10237.12
PPL		2.244	3569.658
SSS		0.002	3.715
SSO		0.031	41.574
SSL		0.014	17.181
OOO		5.103	8259.892
OOL		2.229	2162.151
LLL		0.425	370.054
MPP		0.334	846.578
MPS		0.026	58.036
MPO		0.334	638.745
MPL		0.146	261.866
MSS		0.002	3.984
MSO		0.026	44.11
MSL		0.011	18.136
MOO		0.333	489.068
MOL		0.146	201.171
MLL		0.064	82.767
PSS		0.031	53.922
PSO		0.401	600.337
PSL		0.175	247.482

ตารางที่ ข.11 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		5.123	9188.554
POL		2.237	2760.282
PLL		0.977	1138.619
SOO		0.4	465.9
SOL		0.175	192.614
SLL		0.076	79.646
OLL		0.973	894.408
RRR		< 0.001	2.356
RRM		0.001	2.959
RRP		0.01	39.819
RRS		0.001	2.723
RRO		0.01	29.371
RRL		0.005	11.92
RMM		0.001	3.714
RMP		0.015	49.998
RMS		0.001	3.421
RMO		0.015	37.163
RML		0.007	15.137
RPP		0.233	673.337
RPS		0.018	46.108
RPO		0.233	504.274
RPL		0.102	206.097
RSS		0.001	3.161
RSO		0.018	34.789
RSL		0.008	14.262
ROO		0.232	383.471
ROL		0.101	157.29
RLL		0.044	64.531

ตารางที่ ข. 12 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 100 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.026	0.426
WATER		5027.252	35.749
LAUR-A	952.367	20.879	112.699
MYRI-A	1587.278	33.708	341.886
PALM-A	43914.691	551.676	9388.467
STEA-A	2857.1	50.489	1313.464
OLEI-A	42962.324	590.483	12103.635
LINO-A	12592.405	260.812	4829.609
RNN		0.016	5.544
MNN		0.024	10.38
PNN		0.384	188.915
SNN		0.034	18.555
ONN		0.399	175.564
LNN		0.177	68.46
RRN		0.006	6.021
RMN		0.01	8.737
RPN		0.149	128.358
RSN		0.013	10.524
RON		0.151	102.177
RLN		0.067	41.761
MMN		0.014	12.471
MPN		0.221	180.66
MSN		0.019	14.64
MON		0.225	143.373
MLN		0.1	58.865
PPN		3.38	2586.692
PSN		0.292	207.579
PON		3.424	2504.466
PLN		1.518	844.913
SSN		0.025	16.524
SON		0.295	164.377

ตารางที่ ข.12 (ต่อ)

SLN		0.131	68.026
OON		3.463	2407.168
OLN		1.536	678.439
LLN		0.681	281.022
MMM		0.007	5.6
MMP		0.111	75.519
MMS		0.009	5.763
MMO		0.111	58.787
MML		0.049	24.558
PPP		25.228	13730.94
PPS		2.15	1048.471
PPO		25.265	12569.2
PPL		11.214	4542.429
SSS		0.016	6.129
SSO		0.183	63.845
SSL		0.081	26.941
OOO		25.273	10556.66
OOL		11.219	2935.84
LLL		2.211	523.83
MPP		1.674	1018.228
MPS		0.143	77.712
MPO		1.678	797.288
MPL		0.745	334.007
MSS		0.012	5.934
MSO		0.143	61.208
MSL		0.063	25.709
MOO		1.68	632.178
MOL		0.746	265.642
MLL		0.331	111.646
PSS		0.183	80.122
PSO		2.151	830.631
PSL		0.955	349.727
POO		25.279	11514.59

ตารางที่ ข.12 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POL		11.221	3631.633
PLL		4.981	1529.95
SOO		2.15	665.835
SOL		0.955	281.076
SLL		0.424	118.674
OLL		4.98	1240.008
RRR		0.002	2.476
RRM		0.003	3.254
RRP		0.051	43.963
RRS		0.004	3.358
RRO		0.052	33.823
RRL		0.023	14.039
RMM		0.005	4.271
RMP		0.076	57.638
RMS		0.006	4.399
RMO		0.076	44.605
RML		0.034	18.577
RPP		1.141	777.301
RPS		0.097	59.315
RPO		1.146	605.078
RPL		0.508	252.771
RSS		0.008	4.527
RSO		0.098	46.445
RSL		0.043	19.457
ROO		1.148	477.17
ROL		0.51	199.992
RLL		0.226	83.839

ตารางที่ ข. 13 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 120 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.014	0.057
WATER			5221.375
LAUR-A	952.367	55.679	trace
MYRI-A	1587.278	90.592	trace
PALM-A	43914.691	1479.241	trace
STEA-A	2857.1	141.622	trace
OLEI-A	42962.324	1576.143	trace
LINO-A	12592.405	694.753	trace
RNN		0.016	1.315
MNN		0.025	2.522
PNN		0.399	46.589
SNN		0.037	4.872
ONN		0.413	42.212
LNN		0.182	17.618
RRN		0.013	2.795
RMN		0.019	4.185
RPN		0.289	62.74
RSN		0.026	5.5
RON		0.293	51.684
RLN		0.13	21.231
MMN		0.028	6.157
MPN		0.434	90.96
MSN		0.039	7.875
MON		0.439	74.584
MLN		0.194	30.764
PPN		6.615	1327.102
PSN		0.597	113.708
PON		6.671	1301.962
PLN		2.952	449.107
SSN		0.054	9.658
SON		0.601	92.762

ตารางที่ ข.13 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.266	38.538
OON		6.717	1267.144
OLN		2.973	371.026
LLN		1.316	154.273
MMM		0.027	5.718
MMP		0.411	78.513
MMS		0.037	6.39
MMO		0.41	62.787
MML		0.182	26.309
PPP		93.034	14758.43
PPS		8.294	1199.963
PPO		92.75	13663.41
PPL		41.082	5015.003
SSS		0.066	7.935
SSO		0.735	79.463
SSL		0.326	33.604
OOO		91.943	11713.44
OOL		40.73	3382.903
LLL		7.993	606.104
MPP		6.186	1076.823
MPS		0.552	87.582
MPO		6.174	864.997
MPL		2.734	363.387
MSS		0.049	7.121
MSO		0.55	70.674
MSL		0.244	29.761
MOO		6.155	702.271
MOL		2.726	295.842
MLL		1.208	124.651
PSS		0.739	97.567
PSO		8.261	972.781
PSL		3.659	410.541

ตารางที่ ข.13 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		92.384	12650.19
POL		40.923	4099.458
PLL		18.128	1731.017
SOO		8.221	796.587
SOL		3.642	336.986
SLL		1.613	142.581
OLL		18.043	1431.806
RRR		0.008	2.309
RRM		0.012	3.132
RRP		0.187	43.164
RRS		0.017	3.523
RRO		0.188	34.223
RRL		0.083	14.257
RMM		0.018	4.236
RMP		0.278	58.262
RMS		0.025	4.747
RMO		0.278	46.39
RML		0.123	19.384
RPP		4.187	800.002
RPS		0.374	65.113
RPO		4.183	639.767
RPL		1.852	268.078
RSS		0.033	5.296
RSO		0.373	52.305
RSL		0.165	21.973
ROO		4.174	517.25
ROL		1.849	217.389
RLL		0.819	91.382

ตารางที่ ข. 14 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.011	0.023
WATER		5273.1	10.651
LAUR-A	952.367	85.23	81.735
MYRI-A	1587.278	139.274	243.795
PALM-A	43914.691	2289.026	6594.814
STEA-A	2857.1	222.867	970.207
OLEI-A	42962.324	2432.243	8634.865
LINO-A	12592.405	1066.947	3470.157
RNN		0.017	0.671
MNN		0.026	1.302
PNN		0.415	24.394
SNN		0.039	2.616
ONN		0.428	21.83
LNN		0.188	9.365
RRN		0.017	1.908
RMN		0.026	2.9
RPN		0.395	44.227
RSN		0.036	3.983
RON		0.399	36.991
RLN		0.176	15.172
MMN		0.039	4.331
MPN		0.595	65.052
MSN		0.055	5.784
MON		0.599	54.116
MLN		0.264	22.283
PPN		9.122	964.689
PSN		0.837	84.856
PON		9.174	951.568
PLN		4.041	330.347
SSN		0.077	7.397
SON		0.841	70.138

ตารางที่ ข.14 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.37	29.078
OON		9.211	930.88
OLN		4.057	276.347
LLN		1.787	114.662
MMM		0.049	5.526
MMP		0.742	77.098
MMS		0.067	6.439
MMO		0.739	62.388
MML		0.326	26.077
PPP		170.141	14942.4
PPS		15.425	1245.683
PPO		169.152	13897.05
PPL		74.563	5117.539
SSS		0.126	8.651
SSO		1.386	85.352
SSL		0.611	35.991
OOO		166.757	12011.3
OOL		73.517	3516.378
LLL		14.288	626.337
MPP		11.24	1073.923
MPS		1.02	89.591
MPO		11.186	872.35
MPL		4.93	365.525
MSS		0.092	7.469
MSO		1.014	73.062
MSL		0.447	30.684
MOO		11.122	715.553
MOL		4.902	300.619
MLL		2.161	126.319
PSS		1.397	103.812
PSO		15.321	1019.978
PSL		6.754	429.255

ตารางที่ ข.14 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		168.02	12921.06
POL		74.069	4223.654
PLL		32.652	1778.431
SOO		15.205	842.954
SOL		6.703	355.566
SLL		2.955	150.004
OLL		32.41	1483.95
RRR		0.015	2.135
RRM		0.022	2.94
RRP		0.335	41.22
RRS		0.031	3.455
RRO		0.335	33.118
RRL		0.148	13.766
RMM		0.033	4.036
RMP		0.499	56.433
RMS		0.045	4.721
RMO		0.498	45.499
RML		0.219	18.967
RPP		7.574	787.315
RPS		0.688	65.754
RPO		7.546	637.1
RPL		3.326	266.3
RSS		0.062	5.485
RSO		0.685	53.412
RSL		0.302	22.38
ROO		7.51	520.718
ROL		3.31	218.276
RLL		1.459	91.515

ตารางที่ ข. 15 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 140 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.01	0.01
WATER		5306.867	7.069
LAUR-A	952.367	123.324	67.445
MYRI-A	1587.278	202.68	200.566
PALM-A	43914.691	3369.845	5456.758
STEA-A	2857.1	333.344	812.765
OLEI-A	42962.324	3572.109	7176.729
LINO-A	12592.405	1556.675	2877.32
RNN		0.018	0.364
MNN		0.029	0.716
PNN		0.46	13.684
SNN		0.044	1.502
ONN		0.473	12.104
LNN		0.207	5.321
RRN		0.023	1.325
RMN		0.035	2.047
RPN		0.549	31.89
RSN		0.051	2.946
RON		0.553	27.067
RLN		0.242	11.063
MMN		0.053	3.105
MPN		0.831	47.631
MSN		0.078	4.343
MON		0.836	40.182
MLN		0.366	16.485
PPN		12.899	721.235
PSN		1.203	65.037
PON		12.942	715.277
PLN		5.663	249.335
SSN		0.112	5.81
SON		1.205	54.444

ตารางที่ ข.15 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.527	22.482
OON		12.963	703.31
OLN		5.673	211.122
LLN		2.482	87.248
MMM		0.085	5.2
MMP		1.308	74.054
MMS		0.121	6.337
MMO		1.3	60.616
MML		0.569	25.227
PPP		306.976	14935.19
PPS		28.275	1274.886
PPO		304.461	13954.07
PPL		133.326	5144.357
SSS		0.239	9.274
SSO		2.576	90.243
SSL		1.128	37.872
OOO		298.713	12160.18
OOL		130.826	3599.108
LLL		25.094	634.971
MPP		20.047	1052.457
MPS		1.848	89.934
MPO		19.903	864.241
MPL		8.715	360.515
MSS		0.17	7.677
MSO		1.833	74.1
MSL		0.803	30.977
MOO		19.741	716.031
MOL		8.645	299.445
MLL		3.786	125.25
PSS		2.602	108.752
PSO		28.017	1054.099
PSL		12.27	441.552

ตารางที่ ข.15 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		301.699	13029.44
POL		132.125	4285.772
PLL		57.862	1796.16
SOO		27.738	879.017
SOL		12.148	369.017
SLL		5.321	154.939
OLL		57.297	1511.622
RRR		0.025	1.917
RRM		0.038	2.683
RRP		0.585	38.431
RRS		0.054	3.304
RRO		0.583	31.276
RRL		0.255	12.948
RMM		0.057	3.742
RMP		0.875	53.416
RMS		0.081	4.58
RMO		0.871	43.592
RML		0.381	18.096
RPP		13.431	760.657
RPS		1.24	65.096
RPO		13.349	622.629
RPL		5.845	259.121
RSS		0.114	5.563
RSO		1.231	53.455
RSL		0.539	22.299
ROO		13.254	514.296
ROL		5.804	214.62
RLL		2.541	89.579

ตารางที่ ข. 16 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 500 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.325	237.887
WATER			1789.805
LAUR-A	952.367	0.936	trace
MYRI-A	1587.278	1.202	trace
PALM-A	43914.691	21.387	trace
STEA-A	2857.1	1.258	trace
OLEI-A	42962.324	19.928	trace
LINO-A	12592.405	7.114	trace
RNN		0.016	228.055
MNN		0.019	347.976
PNN		0.333	7060.458
SNN		0.019	457.21
ONN		0.302	5540.523
LNN		0.108	1934.488
RRN		0.001	20.988
RMN		0.001	25.078
RPN		0.01	414.053
RSN		0.001	22.52
RON		0.009	303.676
RLN		0.003	101.364
MMN		0.001	29.435
MPN		0.012	478.697
MSN		0.001	25.705
MON		0.011	349.203
MLN		0.004	117.017
PPN		0.202	7686.036
PSN		0.011	408.307
PON		0.178	6648.206
PLN		0.064	1878.303
SSN		0.001	21.495
SON		0.01	295.942

ตารางที่ ข.16 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.004	99.851
OON		0.157	5703.053
OLN		0.056	1377.84
LLN		0.02	465.258
MMM		< 0.001	0.955
MMP		< 0.001	14.424
MMS		< 0.001	0.728
MMO		< 0.001	10.235
MML		< 0.001	3.482
PPP		0.104	3277.132
PPS		0.006	164.996
PPO		0.09	2672.671
PPL		0.032	800.968
SSS		< 0.001	0.418
SSO		< 0.001	5.987
SSL		< 0.001	2.055
OOO		0.069	1776.28
OOL		0.025	423.203
LLL		0.003	49.926
MPP		0.006	217.536
MPS		< 0.001	10.96
MPO		0.006	154.953
MPL		0.002	52.839
MSS		< 0.001	0.552
MSO		< 0.001	7.838
MSL		< 0.001	2.679
MOO		0.005	111.455
MOL		0.002	38.107
MLL		0.001	13.031
PSS		< 0.001	8.304
PSO		0.005	118.469
PSL		0.002	40.575

ตารางที่ ข.16 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		0.079	2179.066
POL		0.028	579.685
PLL		0.01	198.642
SOO		0.004	85.855
SOL		0.002	29.472
SLL		0.001	10.119
OLL		0.009	145.346
RRR		< 0.001	0.76
RRM		< 0.001	0.822
RRP		< 0.001	12.482
RRS		< 0.001	0.632
RRO		< 0.001	8.794
RRL		< 0.001	2.975
RMM		< 0.001	0.887
RMP		< 0.001	13.432
RMS		< 0.001	0.679
RMO		< 0.001	9.496
RML		< 0.001	3.222
RPP		0.005	202.897
RPS		< 0.001	10.234
RPO		0.005	143.974
RPL		0.002	48.975
RSS		< 0.001	0.516
RSO		< 0.001	7.29
RSL		< 0.001	2.486
ROO		0.004	103.188
ROL		0.001	35.202
RLL		0.001	12.011

ตารางที่ ข. 17 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 100 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.216	7.933
WATER		4400.135	160.934
LAUR-A	952.367	9.684	168.168
MYRI-A	1587.278	14.553	461.289
PALM-A	43914.691	241.936	12621.746
STEA-A	2857.1	19.339	1524.44
OLEI-A	42962.324	245.415	15776.727
LINO-A	12592.405	100.847	5939.29
RNN		0.044	32.019
MNN		0.064	57.161
PNN		1.017	1083.526
SNN		0.079	95.381
ONN		1.002	925.663
LNN		0.413	372.016
RRN		0.006	12.406
RMN		0.008	17.343
RPN		0.132	267.515
RSN		0.01	19.779
RON		0.127	213.598
RLN		0.052	82.066
MMN		0.012	23.817
MPN		0.183	361.855
MSN		0.014	26.414
MON		0.176	287.374
MLN		0.072	110.844
PPN		2.834	5427.903
PSN		0.214	391.972
PON		2.721	5111.281
PLN		1.123	1662.202
SSN		0.016	28.051
SON		0.205	309.293

ตารางที่ ข.17 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.084	120.118
OON		2.609	4773.405
OLN		1.076	1327.433
LLN		0.444	515.942
MMM		0.002	3.806
MMP		0.029	53.707
MMS		0.002	3.682
MMO		0.027	41.489
MML		0.011	16.245
PPP		6.697	10649.93
PPS		0.498	728.893
PPO		6.356	9455.704
PPL		2.625	3261.792
SSS		0.003	3.412
SSO		0.035	39.142
SSL		0.014	15.461
OOO		5.711	7448.196
OOL		2.358	2042.588
LLL		0.402	319.257
MPP		0.437	756.709
MPS		0.033	51.826
MPO		0.416	586.801
MPL		0.172	230.325
MSS		0.002	3.547
MSO		0.031	40.348
MSL		0.013	15.873
MOO		0.394	459.502
MOL		0.163	180.836
MLL		0.067	71.181
PSS		0.037	49.869
PSO		0.473	569.76
PSL		0.195	224.616

ตารางที่ ข.17 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		6.027	8392.943
POL		2.489	2569.973
PLL		1.028	1013.68
SOO		0.448	449.522
SOL		0.185	177.62
SLL		0.076	70.194
OLL		0.974	807.473
RRR		0.001	1.89
RRM		0.001	2.394
RRP		0.015	33.952
RRS		0.001	2.337
RRO		0.015	26.041
RRL		0.006	10.14
RMM		0.001	3.023
RMP		0.021	42.747
RMS		0.002	2.936
RMO		0.02	32.901
RML		0.008	12.848
RPP		0.32	603.241
RPS		0.024	41.361
RPO		0.305	466.009
RPL		0.126	182.466
RSS		0.002	2.833
RSO		0.023	32.074
RSL		0.009	12.589
ROO		0.29	363.609
ROL		0.12	142.778
RLL		0.049	56.075

ตารางที่ ข. 18 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 50 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.101	1.49
WATER		4846.625	70.763
LAUR-A	952.367	19.446	134.8
MYRI-A	1587.278	30.263	382.931
PALM-A	43914.691	494.886	10306.512
STEA-A	2857.1	43.083	1355.742
OLEI-A	42962.324	512.521	13152.72
LINO-A	12592.405	217.932	5123.672
RNN		0.038	10.96
MNN		0.056	20.264
PNN		0.888	377.835
SNN		0.075	36.224
ONN		0.894	329.55
LNN		0.381	137.05
RRN		0.009	7.741
RMN		0.014	11.208
RPN		0.21	170.053
RSN		0.017	13.693
RON		0.207	138.625
RLN		0.088	55.113
MMN		0.02	15.94
MPN		0.301	238.216
MSN		0.025	18.939
MON		0.296	193.149
MLN		0.126	77.091
PPN		4.598	3514.915
PSN		0.377	276.447
PON		4.507	3379.238
PLN		1.924	1137.158
SSN		0.031	21.547
SON		0.369	222.707

ตารางที่ ข.18 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.158	89.499
OON		4.411	3221.987
OLN		1.883	927.163
LLN		0.804	372.9
MMM		0.006	4.808
MMP		0.089	66.748
MMS		0.007	4.984
MMO		0.086	52.644
MML		0.037	21.33
PPP		20.174	12807.08
PPS		1.635	954.644
PPO		19.548	11609.23
PPL		8.353	4143.946
SSS		0.011	5.301
SSO		0.128	57.004
SSL		0.055	23.3
OOO		18.307	9531.77
OOL		7.823	2704.9
LLL		1.429	452.697
MPP		1.339	925.096
MPS		0.109	69.005
MPO		1.299	732.412
MPL		0.555	297.478
MSS		0.009	5.144
MSO		0.105	54.848
MSL		0.045	22.328
MOO		1.259	585.542
MOL		0.538	238.454
MLL		0.23	97.124
PSS		0.132	71.135
PSO		1.583	761.862
PSL		0.676	310.794

ตารางที่ ข.18 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		18.925	10520.35
POL		8.087	3333.44
PLL		3.456	1360.546
SOO		1.531	613.679
SOL		0.654	250.917
SLL		0.28	102.609
OLL		3.343	1106.489
RRR		0.002	2.15
RRM		0.003	2.821
RRP		0.044	39.344
RRS		0.004	2.949
RRO		0.043	30.809
RRL		0.018	12.414
RMM		0.004	3.688
RMP		0.063	51.3
RMS		0.005	3.837
RMO		0.061	40.312
RML		0.026	16.29
RPP		0.948	712.11
RPS		0.077	53.177
RPO		0.92	561.64
RPL		0.393	227.558
RSS		0.006	3.967
RSO		0.075	42.101
RSL		0.032	17.1
ROO		0.893	447.409
ROL		0.381	181.794
RLL		0.163	73.882

ตารางที่ ข. 19 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 10 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.011	0.023
WATER		5273.1	10.651
LAUR-A	952.367	85.23	81.735
MYRI-A	1587.278	139.274	243.795
PALM-A	43914.691	2289.026	6594.814
STEA-A	2857.1	222.867	970.207
OLEI-A	42962.324	2432.243	8634.865
LINO-A	12592.405	1066.947	3470.157
RNN		0.017	0.671
MNN		0.026	1.302
PNN		0.415	24.394
SNN		0.039	2.616
ONN		0.428	21.83
LNN		0.188	9.365
RRN		0.017	1.908
RMN		0.026	2.9
RPN		0.395	44.227
RSN		0.036	3.983
RON		0.399	36.991
RLN		0.176	15.172
MMN		0.039	4.331
MPN		0.595	65.052
MSN		0.055	5.784
MON		0.599	54.116
MLN		0.264	22.283
PPN		9.122	964.689
PSN		0.837	84.856
PON		9.174	951.568
PLN		4.041	330.347
SSN		0.077	7.397
SON		0.841	70.138

ตารางที่ ข.19 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		0.37	29.078
OON		9.211	930.88
OLN		4.057	276.347
LLN		1.787	114.662
MMM		0.049	5.526
MMP		0.742	77.098
MMS		0.067	6.439
MMO		0.739	62.388
MML		0.326	26.077
PPP		170.141	14942.4
PPS		15.425	1245.683
PPO		169.152	13897.05
PPL		74.563	5117.539
SSS		0.126	8.651
SSO		1.386	85.352
SSL		0.611	35.991
OOO		166.757	12011.3
OOL		73.517	3516.378
LLL		14.288	626.337
MPP		11.24	1073.923
MPS		1.02	89.591
MPO		11.186	872.35
MPL		4.93	365.525
MSS		0.092	7.469
MSO		1.014	73.062
MSL		0.447	30.684
MOO		11.122	715.553
MOL		4.902	300.619
MLL		2.161	126.319
PSS		1.397	103.812
PSO		15.321	1019.978
PSL		6.754	429.255

ตารางที่ ข.19 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		168.02	12921.06
POL		74.069	4223.654
PLL		32.652	1778.431
SOO		15.205	842.954
SOL		6.703	355.566
SLL		2.955	150.004
OLL		32.41	1483.95
RRR		0.015	2.135
RRM		0.022	2.94
RRP		0.335	41.22
RRS		0.031	3.455
RRO		0.335	33.118
RRL		0.148	13.766
RMM		0.033	4.036
RMP		0.499	56.433
RMS		0.045	4.721
RMO		0.498	45.499
RML		0.219	18.967
RPP		7.574	787.315
RPS		0.688	65.754
RPO		7.546	637.1
RPL		3.326	266.3
RSS		0.062	5.485
RSO		0.685	53.412
RSL		0.302	22.38
ROO		7.51	520.718
ROL		3.31	218.276
RLL		1.459	91.515

ตารางที่ ข. 20 การจำลองปฏิกิริยาการสังเคราะห์ TMP esters ด้วยปฏิกิริยาเอสเทอร์ฟิเคชันที่อุณหภูมิ 130 องศาเซลเซียส ความดัน 0.1 มิลลิบาร์ (น้ำหนัก: กิโลกรัม)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
TMP	13417.54	0.015	
WATER		5380.393	
LAUR-A	952.367	316.639	
MYRI-A	1587.278	523.577	
PALM-A	43914.691	9493.137	
STEA-A	2857.1	932.118	
OLEI-A	42962.324	9633.526	
LINO-A	12592.405	3664.786	
RNN		0.081	
MNN		0.127	
PNN		2.222	
SNN		0.211	
ONN		2.19	
LNN		0.835	
RRN		0.296	
RMN		0.453	
RPN		7.705	
RSN		0.716	
RON		7.432	
RLN		2.838	
MMN		0.692	
MPN		11.741	
MSN		1.089	
MON		11.3	
MLN		4.315	
PPN		198.718	
PSN		18.395	
PON		190.869	
PLN		72.901	
SSN		1.7	
SON		17.637	

ตารางที่ ข.20 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
SLN		6.737	
OON		183.024	
OLN		69.913	
LLN		26.706	
MMM		3.223	
MMP		53.96	
MMS		4.945	
MMO		51.342	
MML		19.623	
PPP		15065.01	
PPS		1377.379	
PPO		14304	
PPL		5468.02	
SSS		11.479	
SSO		119.228	
SSL		45.584	
OOO		12861.81	
OOL		4917.35	
LLL		718.758	
MPP		902.137	
MPS		82.571	
MPO		857.435	
MPL		327.749	
MSS		7.549	
MSO		78.4	
MSL		29.97	
MOO		814.179	
MOL		311.236	
MLL		118.976	
PSS		125.804	
PSO		1306.556	
PSL		499.496	

ตารางที่ ข.20 (ต่อ)

สาร	สารขาเข้า	สารขาออก (ไอ)	สารขาออก (ของเหลว)
POO		13569.41	
POL		5187.554	
PLL		1983.18	
SOO		1238.346	
SOL		473.449	
SLL		181.01	
OLL		1880.001	
RRR		0.94	
RRM		1.42	
RRP		23.835	
RRS		2.19	
RRO		22.734	
RRL		8.688	
RMM		2.141	
RMP		35.887	
RMS		3.293	
RMO		34.186	
RML		13.065	
RPP		600.738	
RPS		55.049	
RPO		571.591	
RPL		218.469	
RSS		5.039	
RSO		52.321	
RSL		19.999	
ROO		543.309	
ROL		207.675	
RLL		79.381	

ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

ประวัติส่วนตัว นายพลวิชัย ภคประสิทธิ์ เกิดในจังหวัดกรุงเทพมหานคร เมื่อวันที่ 30 พฤศจิกายน 2532 ปัจจุบันอาศัยอยู่บ้านเลขที่ 47/250 หมู่ 8 ถนนบางไผ่-หนองเพรางาย ตำบล บางคูรัด อำเภอบางบัวทอง จังหวัดนนทบุรี 11110

ประวัติการศึกษา พ.ศ. 2549 สำเร็จการศึกษาชั้นมัธยมศึกษาตอนต้นที่ โรงเรียนเซนต์ไมเกิ้ล พ.ศ. 2552 สำเร็จการศึกษาชั้นมัธยมศึกษาตอนปลายที่ โรงเรียนวัดราชบพิธ พ.ศ.2555 สำเร็จการศึกษาระดับปริญญาตรีที่ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย คณะวิศวกรรมศาสตร์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี



