

การประยุกต์ใช้ CFD เพื่ออธิบายการผลิต 1,2- ไดคลอโรอีเทนโดยปฏิกิริยาออกซิคลอรีเนชัน ของเอทิลีนในปฏิกรณ์ฟลูอิดไชน์เบด *

อโนมา คชคง ¹⁾ และ ธงไชย ศรีนพคุณ ²⁾

¹⁾ นักศึกษาปริญญาโท ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ จังหวัดกรุงเทพฯ 10900

²⁾ รองศาสตราจารย์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ จังหวัดกรุงเทพฯ 10900

Email: fengtcs@ku.ac.th

บทคัดย่อ

การจำลองแบบโดยวิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (CFD) ของปฏิกิริยาออกซิคลอรีเนชันของเอทิลีนสำหรับการผลิต 1,2-ไดคลอโรอีเทนในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดไชน์เบดถูกพัฒนาขึ้น โดยการศึกษาที่ใช้แบบจำลองบนพื้นฐานของแบบจำลองการไหลของสองเฟส (Two phase flow) เพื่อจำลองแบบเชิงตัวเลขในสามมิติสำหรับแก๊สและของแข็งในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดไชน์เบด ผลจากการจำลองกระบวนการสามารถอธิบายปรากฏการณ์ในการกระจายตัวของอุณหภูมิและพฤติกรรมต่างๆ ที่เกิดขึ้นได้ เมื่อปรับสภาวะในการดำเนินการโดยเพิ่มสัดส่วนโดยโมลของเอทิลีนจาก 0.227 เป็น 0.356 โดยคงค่าอัตราส่วนโดยโมลของกรดไฮโดรคลอริกต่อออกซิเจนไว้ที่ 3.6 พบว่าสภาวะที่เหมาะสมที่สุดในการดำเนินการเพื่อให้เอทิลีนมีสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงสูงสุดและได้ผลิตภัณฑ์มากที่สุดคือเมื่อค่าสัดส่วนโดยโมลของเอทิลีนที่ป้อนเข้าเท่ากับ 0.34 และเมื่อทำการปรับอุณหภูมิของท่อนหล่อเย็นเพิ่มขึ้นจะมีผลทำให้อุณหภูมิของการดำเนินการเพิ่มขึ้นและได้ค่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของเอทิลีนเพิ่มขึ้นโดยให้ค่าสูงสุดประมาณ 95% ที่อุณหภูมิท่อนหล่อเย็น 450 K

คำสำคัญ: พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ, ปฏิกิริยาออกซิคลอรีเนชันของเอทิลีน

*
รับต้นฉบับเมื่อวันที่ 6 สิงหาคม 2547 และได้รับบทความฉบับแก้ไขเมื่อวันที่ 31 สิงหาคม 2547

Appplication of CFD for 1,2-dichloroethane production by ethylene oxychlorination in fluidized bed reactor *

Anoma Kodchakong ¹⁾ and Thongchai Srinophakun ²⁾

¹⁾ Graduated Student, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Kasetsart University, Bangkok, 10900

²⁾ Associate Professor, Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Kasetsart University, Bangkok, 10900

Email: fengtes@ku.ac.th

Abstract

A computational fluid dynamics simulation, CFD, of ethylene oxychlorination for the production of 1,2-dichloroethane in a fluidized-bed reactor is developed in this research. This CFD model bases on two-phase flow model that is used to perform the high resolution of three-dimension numerical simulations of gas-solid in a fluidized bed. The results can be shown as the profile of temperature and parameters distribution. In the study of ethylene mole fraction from 0.227 to 0.356 with constant ratio of hydrochloric acid to oxygen at 3.6, the optimum operating condition for a maximum ethylene conversion is found at mole fraction of ethylene equal to 0.34. The behavior of fluid in the operating temperature and ethylene conversion gradually increase according to the increase of cooling coils temperature from 300 to 450 K. The maximum ethylene conversion, 95%, occurred at cooling coils temperature of 450 K.

Keywords : CFD, ethylene oxychlorination

บทนำ

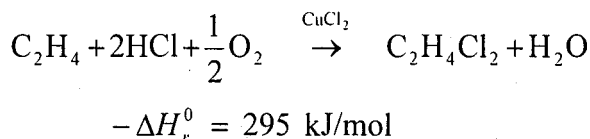
ในช่วงไม่กี่ปีที่ผ่านมา มีความพยายามที่จะศึกษาเพื่ออธิบายปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดซ์เบดกันอย่างแพร่หลาย โดยแบบจำลองต่างๆ ที่ถูกสร้างขึ้นมักจะถูกกำหนดให้อยู่ภายใต้สภาวะที่จำกัด เช่น ให้อยู่ในกระบวนที่อุณหภูมิคงที่ (Isothermal) หรือให้สมการจลนศาสตร์เป็นแบบเส้นตรงหรือให้ขนาดของฟองคงที่ แต่แม้ว่าจะมีความพยายามที่จะพัฒนากันอย่างต่อเนื่องก็ไม่มีแบบจำลองใดที่น่าเชื่อถือพอสำหรับการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์แบบฟลูอิดซ์-เบดแบบมีตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนั้นในการออกแบบหรือขยายขนาดของเครื่องปฏิกรณ์แบบฟลูอิดซ์-เบด จึงมีราคาสูงและต้องใช้เวลาในการรวมรวมข้อมูลจากการสังเกต [El-Halwagi and El-Rifai, 1988] และสิ่งหนึ่งที่ควรจะต้องเตรียมไว้เสมอสำหรับการใช้วิธีนี้ การขยายขนาด คือ ปัญหาที่ไม่คาดคิด ซึ่งเกิดจากการขาดความเข้าใจเกี่ยวกับพฤติกรรมของสารภายในฟลูอิดซ์เบด

วิธีพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (CFD) ได้ก้าวเข้ามาเป็นเครื่องมือทางวิศวกรรมที่จะใช้ในการทำนายการไหลในหลายแขนงเพราะมีความง่ายและลดระยะเวลาที่ใช้ในการคำนวณ ซึ่งวิธี CFD คือ กระบวนการในการนำเอาระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (Numerical Method) มาประยุกต์ใช้ในการแก้ระบบสมการการเคลื่อนที่ของ พลศาสตร์ของไหล (Fluid Dynamics) การถ่ายเทความร้อน (Heat Transfer) การถ่ายเทมวล (Mass Transfer) และอื่นๆ โดยใช้การเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ (Computer Programming) ช่วยในการคำนวณ โดยลักษณะที่สนใจสามารถจำลองผ่านหน้าจอคอมพิวเตอร์เพียงเครื่องเดียว โดยวิธีนี้ได้ผ่านการพิสูจน์แล้วว่ามีความน่าเชื่อถือกับ code CFD เช่น โปรแกรม CFX ในการใช้เพื่อจำลองแบบบนพื้นฐานทางกลศาสตร์และปัญหาการถ่ายเทความร้อน แบบจำลองเชิงคำนวณได้อธิบายทั้งเฟสที่ไหลอย่างต่อเนื่องและเฟสที่เกิดการกระจายตัวโดยแบบจำลองที่เรียกว่า Eulerian ในแบบจำลองนี้เฟสที่กระจายตัวจะถูกอธิบายเป็นเหมือนกับของไหลที่ไหลต่อเนื่อง ดังนั้น การคำนวณจะมีเฉพาะสัดส่วนของปริมาตรเฉลี่ย, ความเร็ว, และอื่นๆ โดยไม่ใช่คุณสมบัติของแต่ละหยดของไหลที่กระจายตัว

บทความนี้มีจุดประสงค์หลักเพื่อนำเสนอแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ที่ใช้อธิบายไฮโดรไดนามิกส์ที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์ฟลูอิดซ์เบด ที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันเพื่อให้ 1,2-ไดคลอโรเอthin โดยสมมุติฐานของปัญหาเป็นแบบ Eulerian-Eulerian สำหรับการไหลหลายเฟสถูกนำมาใช้กับระบบที่ประกอบด้วยของไหลและอนุภาคของแข็งรวมทั้งมีปฏิกิริยาทางเคมีเกิดขึ้น ซึ่งผลจากการทำนายโดยแบบจำลองจะถูกนำมาเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากโรงงานไทยพลาสติกและเคมีภัณฑ์เพื่อยืนยันความถูกต้องของแบบจำลองจากนั้นนำแบบจำลองนี้ไปทำนายผลอันจะเกิดจากการปรับเปลี่ยนสภาวะในการดำเนินการต่างๆ

ปฏิกรณ์ออกซิคลอรินชั้นสำหรับ 1,2-ไดคลอโรอีเทน

1,2-ไดคลอโรอีเทน ($C_2H_4Cl_2$ or EDC) ถูกใช้เป็นสารตั้งต้นสำหรับกระบวนการผลิตไวนิลคลอไรด์โมโนเมอร์ (VCM) ซึ่งเป็นสารเคมีที่ใช้กันอย่างกว้างขวางที่สุดชนิดหนึ่งและถูกผลิตมากที่สุดในโลก 1,2-ไดคลอโรอีเทน สามารถผลิตได้จากปฏิกิริยาคลอรีนชั้นหรือออกซิคลอรินชั้นของเอทิลีนในที่มีออกซิเจนและไฮโดรเจนคลอไรด์ โดยในเครื่องปฏิกรณ์ออกซิคลอรินชั้นของโรงงานไทยพลาสติกและเคมีภัณฑ์เอทิลีนจะทำปฏิกิริยากับกรดไฮโดรคลอริกแห้ง และออกซิเจนบริสุทธิ์ในที่มีตัวเร่งปฏิกิริยา (งานนี้ใช้ Oxychloro VIII เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา) ที่สภาวะในการดำเนินการที่ประมาณ 500 K และ 3 kg/cm²G เพื่อให้เกิดเอทิลีนไดคลอไรด์และน้ำ ซึ่งสามารถแสดงสมการการเกิดปฏิกิริยาทางเคมีรวมได้เป็น



อัตราการเกิดปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์สำหรับงานนี้ได้นำมาจากงานของ Wachi and Asai (1994) สำหรับกระบวนการของการเกิด 1,2-ไดคลอโรอีเทน และค่าเหล่านี้เคยถูกใช้ในงานของ Al-Zahrani et. al. (2001) สำหรับสภาวะทางจลนศาสตร์ที่เป็นปฏิกิริยาเป็นอันดับหนึ่งและขึ้นกับความเข้มข้นของคิวปริคลอไรด์ ($CuCl_2$) ความสัมพันธ์กับความเข้มข้นของเอทิลีนได้ถูกแสดงโดยกลไก Langmuir-Hinshelwood อย่างไรก็ตาม ผลที่ตามมาจากการเกิดปฏิกิริยาเป็นไปได้ที่จะกระทำต่อผ่านปฏิกิริยาคลอรีนชั้นของเอทิลีนโดยคิวปริคลอไรด์ กรดไฮโดรคลอริก และออกซิเจน เกิดเป็นแก๊สของคอปเปอร์ ซึ่งอัตราการเกิดปฏิกิริยามีรูปแบบดังนี้

$$r = \frac{k_r K_a C_E C_C}{1 + K_a C_E}$$

เมื่อ

$$k_r = 269 \exp(-37.8/RT), \quad K_a = 0.63$$

โครงสร้างสำหรับเครื่องปฏิกรณ์ออกซิคลอรินชั้นในอุตสาหกรรมมีความซับซ้อนมาก โดยเครื่องปฏิกรณ์มีขนาดความยาวในช่วงกว้างเริ่มจากหน่วยเมตร (เส้นผ่านศูนย์กลางและความยาว) จนถึงขนาดเล็กในหน่วยมิลลิเมตร (ช่องเล็กๆของส่วนการผสมแก๊สป้อนเข้า) การไหลของของไหลในปฏิกรณ์ให้ความร้อนออกมาเป็นปริมาณมากจากปฏิกิริยาคายความร้อนดังนั้นการใส่ท่อหล่อเย็นจึงมีความสำคัญ ความเร็วของของไหลในส่วนต่างๆของเครื่องปฏิกรณ์ออกซิคลอรินชั้นมีความแตกต่างกันมาก การแก้ปัญหาความแตกต่างของขนาดความยาวและความเร็ว (โดยทั่วไปอยู่ในช่วง 0.01 ถึง 4 m. และ 0.2 ถึง 100 m/s) พร้อมกันอาจจะเกินข้อจำกัดของแหล่งทางการคำนวณ (Ranade, 1996 และ Ranade, 2002) ดังนั้น งานนี้จะพิจารณาเฉพาะส่วนของท่อหล่อเย็นของปฏิกรณ์โดยไม่คิดรายละเอียดของส่วนล่างของปฏิกรณ์รวมทั้งรายละเอียดของอุปกรณ์รองรับภายในและตัวป้อนสารแบบกระจายและส่วน

ของการผสม และสมมติให้มีความเร็วและการกระจายของสารป้อนเข้าสม่ำเสมอ ตลอดหน้าตัดของปฏิกรณ์

การจำลองแบบแบบ Eulerian–Eulerian

งานนี้ใช้การมองปัญหาแบบ Eulerian–Eulerian โดยแบ่งของไหลเป็นสองเฟสคือเฟสของแก๊สและของแข็ง ซึ่งกฎของการอนุรักษ์มวลและโมเมนตัมถูกนำมาใช้กับแต่ละเฟส เมื่อพิจารณาถึงความดันลกดก็จำเป็นต้องใช้สมการสำหรับการไหลแบบอัดตัวได้ การคำนวณความหนาแน่นของแก๊สที่จุดต่างๆ (เป็นฟังก์ชันของความดัน, อุณหภูมิและน้ำหนักโมเลกุลของแก๊ส) จะหาได้จากสมมติฐานสำหรับแก๊สอุดมคติ ซึ่งภายใต้สภาวะที่ใช้ดำเนินการจะพบว่า การไหลเป็นแบบปั่นป่วน ค่าความเค้นของการไหลแบบปั่นป่วนถูกจำลองแบบโดยใช้แบบจำลอง $k-\varepsilon$ โดยสมการทั่วไปสำหรับการทำนายคุณสมบัติทางไฮโดรไดนามิกส์คือสมการอนุรักษ์มวลและโมเมนตัมสามารถแสดงได้ดังนี้

สมการความต่อเนื่อง (สำหรับทั้งสองเฟส)

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) = S_{M\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_p} \Gamma_{\alpha\beta} \quad (1)$$

สมการโมเมนตัม (สำหรับแก๊ส)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha U_\alpha \otimes U_\alpha)) \\ &= -r_\alpha \nabla \rho_\alpha + \nabla \cdot (r_\alpha \mu_\alpha (\nabla U_\alpha + (\nabla U_\alpha)^T)) + \sum (\Gamma_{\alpha\beta}^+ U_\beta - \Gamma_{\beta\alpha}^+ U_\alpha) + S_{M\alpha} + M_\alpha \end{aligned} \quad (2)$$

สมการโมเมนตัม (สำหรับของแข็ง)

$$\frac{\partial}{\partial t}(r_\alpha \rho_\alpha U_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha U_\alpha \otimes U_\alpha)) = -r_\alpha \nabla P_f - \nabla P_s + \nabla \cdot (r_s \tau_s) + S_M + M_s \quad (3)$$

การถ่ายเทโมเมนตัมระหว่างเฟส, $M_{\alpha\beta}$, เกิดขึ้นจากแรงทำระหว่างเฟส α ที่กระทำกับเฟส β ที่รอยต่อของสองเฟส ซึ่งแรงทั้งหมดบนเฟส α จากเฟสอื่นๆ แสดงโดย M_α และสามารถหาค่าได้โดย

$$M_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} M_{\alpha\beta} \quad (4)$$

เทอมทางด้านซ้ายมือของสมการที่ (4) จะมีความแตกต่างกันขึ้นกับบริเวณและลักษณะของการไหลซึ่งโดยทั่วไปเป็นผลจากแรง เช่น แรงต้านระหว่างเฟส (Interphase drag force), แรงยก (lift force), แรงที่กระทำต่อผนัง (wall lubrication force), แรงที่เกิดจากมวล (virtual mass force), แรงจากการแพร่แบบปั่นป่วน (turbulence dispersion force), และแรงจากความดันของแข็ง (solids pressure force) เป็นต้น

ค่าแรงต้านระหว่างเฟสที่กระทำลงบนเฟส α จากเฟส β สามารถหาอธิบายได้โดยสมการต่อไปนี้

$$M_{\alpha\beta}^D = c_{\alpha\beta}^{(d)}(U_\beta - U_\alpha) \quad (5)$$

ค่าสัมประสิทธิ์แรงต้านจากแบบจำลองแรงต้านของ Gidaspow [Gidaspow, 1994] เป็นดังนี้

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{r_c^{-1.65}}{8} A_{\alpha\beta} \rho_\alpha |U_\beta - U_\alpha| \max\left(\frac{24}{Re'}, (1 + 0.15(r_c Re')^{0.687}) 0.44\right), r_c > 0.8 \quad (6)$$

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = 150 \frac{(1-r_c)^2 \mu_c}{r_c d_p^2} + \frac{7(1-r_c) p_c \mu_c |U_c - U_d|}{4 d_p}, r_c < 0.8 \quad (7)$$

พจน์ของความดันของแข็ง (solid pressure) สามารถหาค่าได้จาก

$$\nabla P_s = G(r_s) \nabla r_s, \quad G(r_s) = \frac{\partial P_s}{\partial r_s} \quad (8)$$

โดย

$$G(r_s) = G_0 \exp(-c(r_s - r_{sm})) \quad (9)$$

สมการที่ (9) เป็นรูปแบบทางฟังก์ชันของโมดูลัสความยืดหยุ่นของของแข็ง โดยค่า $G_0 = 1 \text{ Pa}$ และ $c = 10 \text{ to } 600$ (Bouillard et al., 1989)

สมการสำหรับความปั่นป่วนถูกนำมาคิดรวมเข้ากับเฟสของของไหล โดยงานนี้ใช้แบบจำลองความปั่นป่วน $k - \varepsilon$ แสดงดังสมการต่อไปนี้

การเคลื่อนที่ของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (10)$$

การเคลื่อนที่ของอัตราการลดลงของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน

$$\frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (11)$$

สมการพลังงาน

ในแบบจำลองของหลายเฟส ค่าเอนทัลปีและอุณหภูมิสำหรับแต่ละเฟสจะคิดแยกจากกัน การถ่ายเทความร้อนจะถูกครอบคลุมโดยสมการพลังงานทางความร้อนของหลายเฟส แสดงได้โดย

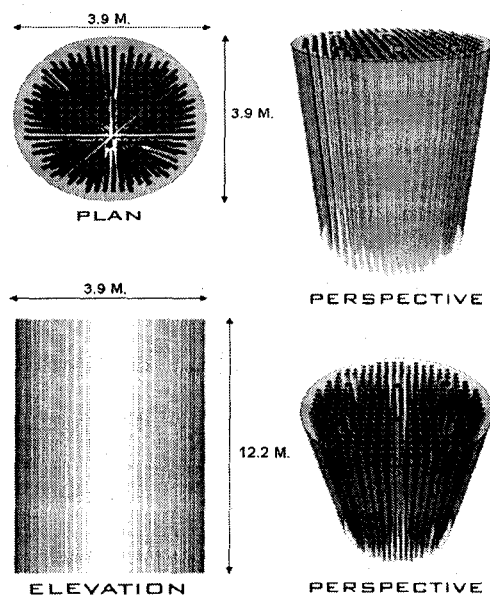
$$\frac{\partial}{\partial t} (r_\alpha \rho h_\alpha) + \nabla \cdot (r_\alpha (\rho_\alpha U_\alpha h_\alpha - \lambda_\alpha \nabla T_\alpha)) = \sum_{\beta=1}^{N_p} (\Gamma_{\alpha\beta}^+ h_{\beta s} - \Gamma_{\beta\alpha}^+ h_{\alpha s}) + Q_\alpha + S_\alpha \quad (13)$$

โดย

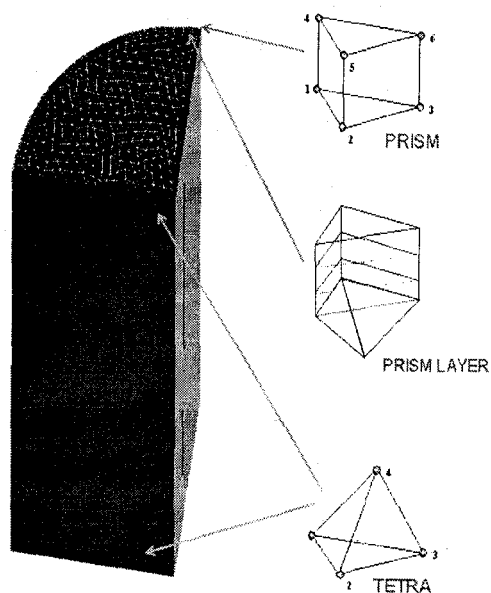
$$Q_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} Q_{\alpha\beta} \quad (14)$$

แบบจำลองกระบวนการ

แบบจำลองนี้ มีการหาผลเฉลยของสมการอนุพันธ์ที่ใช้อธิบายการเปลี่ยนแปลงบนโดเมนของปัญหาภายใต้สภาวะขอบเขตที่กำหนดโดยวิธีการแก้สมการหาค่าตอบบนพื้นฐานของหนึ่งหน่วยปริมาตร ซึ่งการแก้ปัญหอนุพันธ์นี้มีชื่อว่าวิธีไฟไนต์วอลุ่ม (finite volume method) โดยสมการเชิงอนุพันธ์จะแสดงเป็นการอนุกรมหนึ่งหน่วยปริมาตรควบคุมขนาดเล็กมาก งานนี้ใช้รูปร่างของส่วนที่ไหลขึ้น (riser) ของปฏิกรณ์ฟลูอิดไดส์เบดชนิดไหลเวียนขึ้นซึ่งองค์ประกอบแสดงดังรูปที่ 1 ผนังของปฏิกรณ์ถูกสมมติให้เป็นผนังแกร่งแบบไม่ลื่น (no-slip) รูปร่างของเครื่องปฏิกรณ์ในสามมิติอยู่ภายใต้สมมุติฐานที่ว่าเครื่องปฏิกรณ์มีความสมมาตร ดังนั้น หนึ่งในสี่ของปฏิกรณ์ถูกนำมาใช้ในการจำลองแบบและหนึ่งในแปดส่วนของปฏิกรณ์ถูกนำมาใช้ในการสร้าง กริดโดยโปรแกรม ICFM CFD4.CFX กริดที่สร้างขึ้นมีจำนวนทั้งหมดประมาณ 200,000 เอลิเมนต์ (มีขนาดโดยทั่วไป 9 ซม. และมีขนาดใหญ่ที่สุด 12 ซม.) ซึ่งเป็นการสร้างอย่างละเอียดและครอบคลุมปัญหามากที่สุดเท่าที่ความสามารถของคอมพิวเตอร์ที่มีจะทำงานได้ โดยกริดที่ใช้มีสองลักษณะคือแบบเตตระฮีดรอลและแบบปริซึม กริดแบบเตตระฮีดรอลจะถูกสร้างทั่วบริเวณของปัญหาหลังจากนั้นจึงสร้างกริดแบบปริซึมขึ้นมาที่บริเวณผิวของเครื่องปฏิกรณ์ หนึ่งปริมาณกริด ดังกล่าวจะได้รับการปรับเปลี่ยนเพื่อลดปริมาณกริดที่จะนำมาคำนวณดังแสดงระบบของกริดที่เสร็จสมบูรณ์ในรูปที่ 2 จากนั้นแบบจำลองเชิงคำนวณที่สร้างขึ้นถูกจำลองลงบนโปรแกรมซึ่งคิดโดยวิพลศาสตร์ของของไหลเชิงคำนวณมีชื่อว่าโปรแกรม CFX 5.6 ของบริษัท AEA Technology ซึ่งการจำลองแบบถูกทำลงบนเครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคล (AMD Athlon(TM)XP 2400+, 2.00 GHz, 1.50 GB of RAM) รายละเอียดของค่าตัวแปรสำหรับการจำลองแบบสามารถสรุปได้ดังตารางที่ 1



รูปที่ 1 แสดงรูปแบบของส่วนของปฏิกรณ์ที่ใช้จำลองแบบในสามมิติ



รูปที่ 2 แสดงรูปร่างของเอลิเมนต์พื้นฐานที่ใช้ในการสร้างกริด

ข้อมูล	ค่าตัวแปร
อัตราการป้อนเข้าของ C_2H_4	7008 m^3/hr
อัตราการป้อนเข้าของ HCl	13,600 m^3/hr
อัตราการป้อนเข้าของ O_2	3,751 m^3/hr
น้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยาในปฏิกรณ์	78000 kg
ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของตัวเร่งปฏิกิริยา	51 μm
ความหนาแน่นของตัวเร่งปฏิกิริยา	580 kg/m^3
ความดันที่สภาวะดำเนินการ	3.0 $kg/cm^2 G$
อุณหภูมิที่สภาวะดำเนินการ	500 K
อุณหภูมิขาเข้าของแก๊ส	450 K
อุณหภูมิของท่อหล่อเย็น	355 K

ตารางที่ 1 ข้อมูลจากการออกแบบและการดำเนินการที่ใช้ในการจำลองแบบ

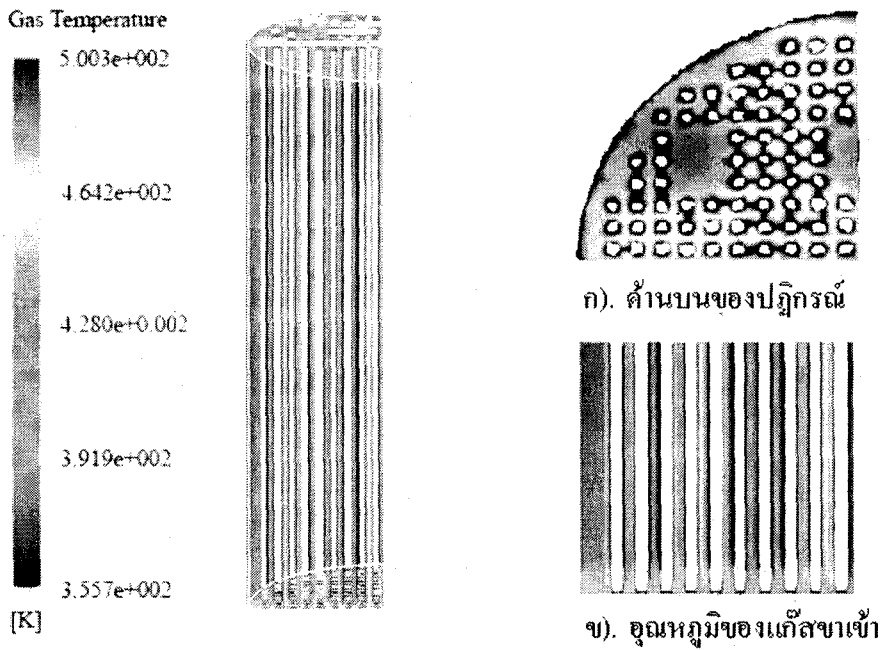
ผลการทดลองและการวิจารณ์ผลการทดลอง

ค่าจากการทำนาย โดยแบบจำลองถูกนำมาเปรียบเทียบกับข้อมูลทางอุตสาหกรรมจากโรงงานไทยพลาสติกและเคมีภัณฑ์ ผลที่ได้แสดงให้เห็นอย่างชัดเจนว่ามีความสอดคล้องเป็นอย่างดีกับข้อมูลจากทางโรงงานดังตารางที่ 2 แต่จะเห็นว่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงที่คำนวณได้และจากทางโรงงานมีความแตกต่างกันเล็กน้อย เนื่องมาจากในการจำลองแบบไม่ได้คิดส่วนของสารที่ออกจากตัวกระจายสารที่ป้อนเข้า ทำให้มีระยะเวลาในการอยู่ในปฏิกรณ์น้อยกว่าทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงเป็นผลิตภัณฑ์ได้น้อยกว่า

สภาวะ	โรงงาน	แบบจำลอง	%คลาดเคลื่อน
อุณหภูมิแก๊สเข้า	450 K	450 K	0%
อุณหภูมิแก๊สออก	500 K	500 K	0%
ความดันที่สภาวะดำเนินการ	3 cm ² /kg G	3 cm ² /kg G	0%
ระยะเวลาที่สารอยู่ในปฏิกรณ์	29 s	23 s	20.69%
ความเร็วแก๊สในท่อเปล่า	0.21-0.43 m/s	0.33-0.58 m/s	-
สัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของ C ₂ H ₄	97.27%	93.12%	4.27%
สัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของ HCl	99.62%	96.13%	3.50%

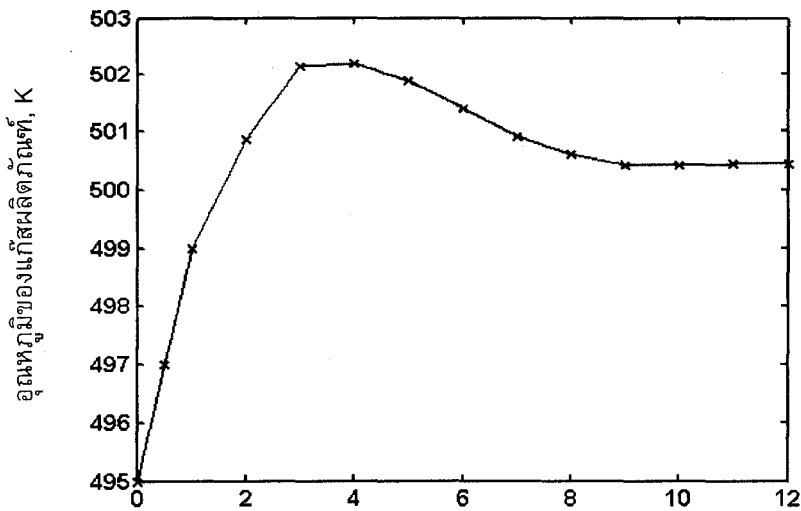
ตารางที่ 2 การเปรียบเทียบระหว่างการทำนายจากแบบจำลองและข้อมูลจากโรงงาน

บทความนี้ได้ศึกษาการจำลองแบบสำหรับการดำเนินการที่สภาวะจริงในส่วนเครื่องปฏิกรณ์ที่ประกอบด้วยท่อหล่อเย็น เพื่อดูการเปลี่ยนแปลงทางไฮโดรไดนามิกส์ของการเคลื่อนที่ของแก๊สและอนุภาคของของแข็ง โดยสามารถแสดงการเปลี่ยนแปลงที่เกิดในเครื่องปฏิกรณ์จากการจำลองแบบได้เป็นเส้นแนวระดับบนพื้นผิวของชิ้นส่วนที่นำมาจำลองแบบแสดงดังรูปที่ 3 และ 4



รูปที่ 3 แสดงเส้นแนวระดับของอุณหภูมิบนระนาบต่างๆ บนปฏิกรณ์ออกซิคลอรีนชั้น

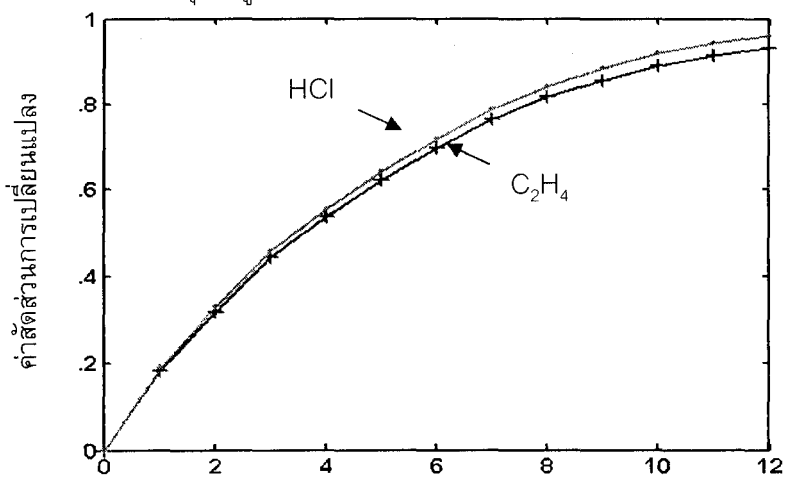
รูปที่ 3 แสดงการกระจายตัวของอุณหภูมิของแก๊สบนระนาบที่ห่างจากเส้นผ่าศูนย์กลางเป็นระยะ 0.15 เซนติเมตร จากรูปจะเห็นการกระจายตัวของอุณหภูมิก่อนข้างสม่ำเสมอตามแนวรัศมี โดยที่ระยะใกล้ผิวด้านนอกของปฏิกรณ์จะมีอุณหภูมิสูงเนื่องจากไม่มีท่อหล่อเย็นช่วยถ่ายเทความร้อนออก และจากการกระจายตัวของอุณหภูมิซึ่งสังเกตได้จากบริเวณที่ของไหลไหลออก (ด้านบนของปฏิกรณ์) ดังรูป 3 ก) พบว่าของไหลบริเวณช่องซึ่งเกิดจากการติดตั้งโซโคลนภายในเครื่องปฏิกรณ์จะมีอุณหภูมิสูงกว่าบริเวณอื่นๆ รูป 3 ข) แสดงให้เห็นการกระจายตัวของอุณหภูมิของแก๊สที่บริเวณระหว่างท่อหล่อเย็นที่บริเวณที่ป้อนแก๊สเข้าสู่ปฏิกรณ์ จากภาพจะเห็นว่ากระแสการไหลของแก๊สที่ไหลผ่านช่องระหว่างท่อจะมีอุณหภูมิสูงที่สุดบริเวณจุดกึ่งกลางระหว่างท่อหล่อเย็นและมีอุณหภูมิลดลงจนกระทั่งมีอุณหภูมิต่ำเท่ากับที่ผิวของท่อหล่อเย็นที่บริเวณผิวสัมผัส ซึ่งจากการจำลองแบบจะสามารถแสดงกระแสความร้อน และสามารถหาค่าอุณหภูมิของของไหลได้ตลอดช่วงของปฏิกรณ์ที่ทำการจำลองแบบ



ระยะความสูงของปฏิกรณ์, เมตร

รูปที่ 4 แสดงค่าอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์เฉลี่ยตลอดแนวความสูงของปฏิกรณ์

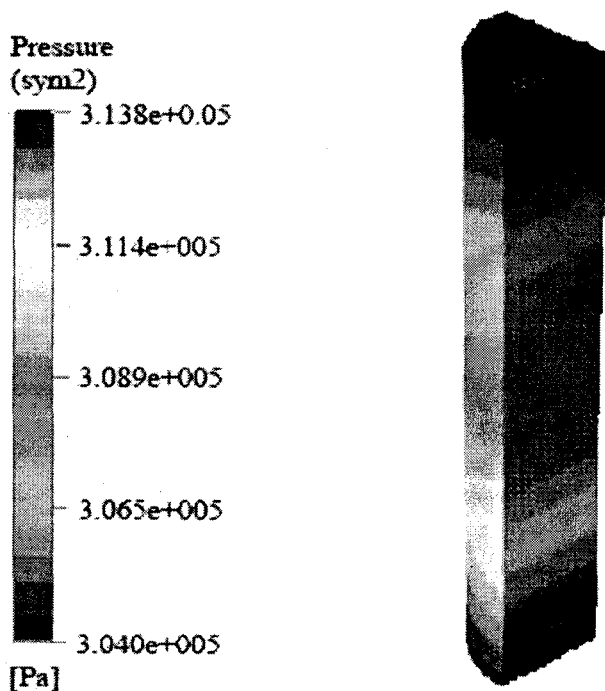
รูปที่ 4 แสดงค่าเฉลี่ยอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่ระดับความสูงต่างๆ เมื่อสารตั้งต้นถูกป้อนเข้าจากด้านล่างของปฏิกรณ์ จะสังเกตเห็นแนวโน้มการเพิ่มขึ้นของอุณหภูมิสูงขึ้นอย่างรวดเร็วในช่วงแรกและค่อยๆ ลดลงจนคงที่ เนื่องจากในช่วงแรกสารตั้งต้นของปฏิกิริยามีความเข้มข้นสูงและค่อยๆ มีความเข้มข้นลดลงเมื่อไหลผ่านเป็นระยะทางมากขึ้น โดยอุณหภูมิเฉลี่ยสูงสุดของแก๊สมีค่า 502 K ที่ระยะประมาณ 4 เมตร และมีอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่ได้มีค่าประมาณ 500 K



ระยะความสูงของปฏิกรณ์, เมตร

รูปที่ 5 แสดงสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของ C_2H_4 และ HCl ตามระยะความสูงของปฏิกรณ์

รูปที่ 5 แสดงค่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงเมื่อแก๊สผ่านระดับความสูงต่างๆของปฏิกรณ์ ซึ่งจากรูปพบว่าเมื่อแก๊สเดินทางห่างจากตำแหน่งป้อนสารเข้ามากขึ้น แก๊สจะมีค่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงเพิ่มขึ้น เนื่องจากมีระยะเวลาในการทำปฏิกิริยาในปฏิกรณ์นานขึ้น



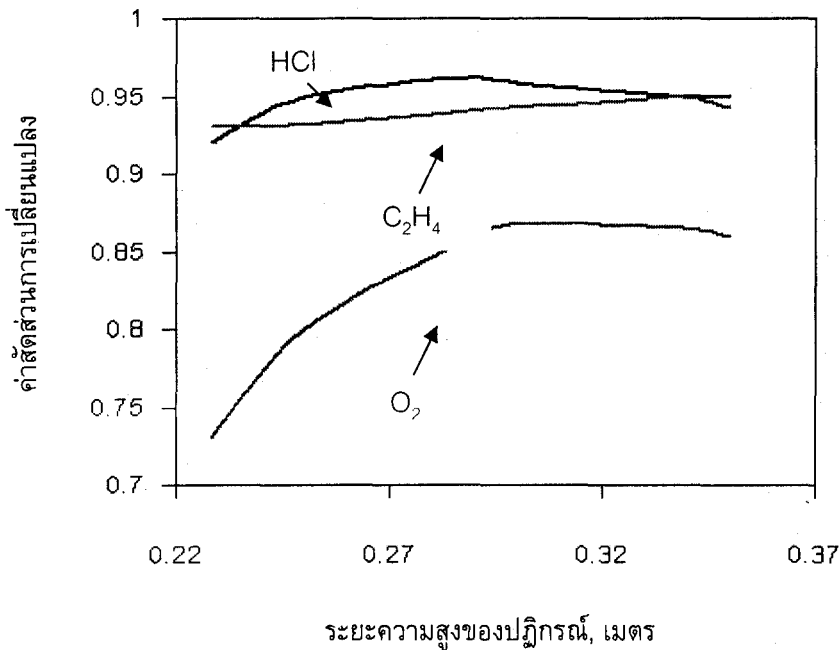
รูปที่ 6 แสดงเส้นแนวระดับการกระจายตัวของความดัน

รูปที่ 6 แสดงเส้นแนวระดับของการกระจายตัวของความดันที่ผิวของส่วนถูกจำลองแบบ (เครื่องปฏิกรณ์โสมมาตร) พบว่าระดับความดันของแก๊สที่ไหลผ่านเครื่องปฏิกรณ์มีค่าลดลงตลอดแนวความยาวเนื่องจากการสูญเสียพลังงานให้กับแรงต้านต่างๆ

ผลจากการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนการป้อนสารเข้า

อัตราการป้อนเข้าของเอทิลีนมีการเปลี่ยนแปลงในช่วง 400 ถึง 700 mol/s โดยปรับค่าความเข้มข้นของกรดไฮโดรคลอริกและออกซิเจนไว้ที่ 1069 และ 295 mol/s ตามลำดับ ซึ่งอัตราส่วนโดยโมลของกรดไฮโดรคลอริกและออกซิเจนคิดเป็น 3.6 แสดงผลดังรูปที่ 7 พบว่าเมื่อสัดส่วนโดยโมลของเอทิลีนที่ป้อนเข้ามีค่าเพิ่มมากขึ้นในช่วงแรกค่าการเปลี่ยนแปลงของกรดไฮโดรคลอริกและออกซิเจนเพิ่มขึ้นด้วยเนื่องจากมีปริมาณมากเกินไป และในช่วงแรกปริมาณของผลิตภัณฑ์ 1,2-ไดคลอโรอีเทนที่ได้จะได้เพิ่มมากขึ้นตามสัดส่วนการป้อนเข้าของเอทิลีนจนกระทั่งเมื่อสัดส่วนโดยโมลของเอทิลีนมีค่าประมาณ 0.34 ค่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของกรดไฮโดรคลอริกและออกซิเจนจะเริ่มคงที่และสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของเอทิลีนเริ่มมีค่าลดลงเนื่องจากอัตราส่วนโดยโมลของกรดไฮโดรคลอริกและ

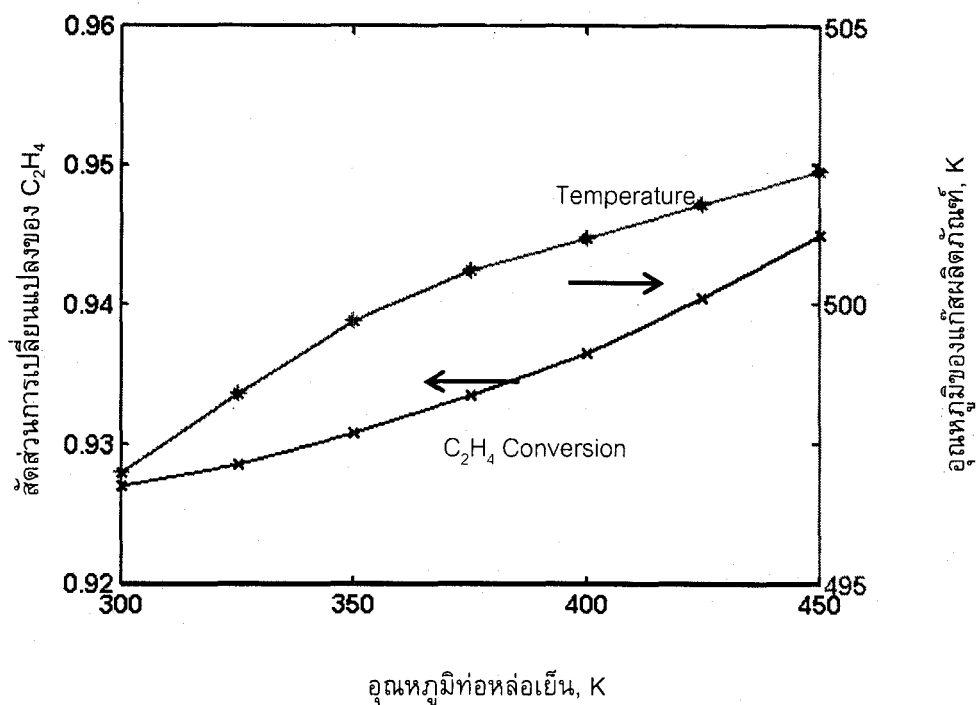
ออกซิเจนมีค่าลดลงจนความเข้มข้นของเอทิลีนจึงไม่ได้เป็นตัวกำหนดอัตราการเกิดปฏิกิริยาอีกต่อไป



รูปที่ 7 แสดงผลของสัดส่วนโดยโมลของ C_2H_4 ต่อค่าสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของก๊าซที่ป้อนเข้า

ผลจากการเปลี่ยนอุณหภูมิของท่อหล่อเย็น

อุณหภูมิสำหรับกระบวนการผลิตในโรงงานถูกควบคุมผ่านอัตราไหลผ่านของน้ำหล่อเย็น ในที่นี้จึงทำการศึกษาถึงผลของอุณหภูมิของท่อหล่อเย็นต่อค่าการเปลี่ยนแปลงของเอทิลีนและอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์ที่ได้ จากรูปที่ 8 พบว่าเมื่อเพิ่มอุณหภูมิของท่อหล่อเย็นจาก 300 เป็น 450 K พบว่าค่าการเปลี่ยนแปลงของ C_2H_4 มีค่าเพิ่มขึ้นจาก 0.927 จนถึง 0.945 และอุณหภูมิของแก๊สที่ได้มีค่าเพิ่มขึ้นจาก 497.5 จนถึง 502.5 K ซึ่งอุณหภูมิของท่อหล่อเย็นเป็นตัวแปรหนึ่งในสมการพลังงานความร้อนและเมื่ออุณหภูมิของท่อหล่อเย็นมีค่าเพิ่มขึ้นจะมีผลต่อเทอมการนำความร้อนออกจากปฏิกรณ์ทำให้มีอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์เพิ่มขึ้นด้วย



รูปที่ 8 แสดงผลของอุณหภูมิของท่อหล่อเย็นต่อสัดส่วนการเปลี่ยนแปลงของ C_2H_4 และอุณหภูมิของแก๊สผลิตภัณฑ์

สรุปผลจากการจำลองแบบ

แบบจำลองโดยวิธี CFD ถูกใช้เพื่อทำนายประสิทธิภาพของปฏิกรณ์ฟลูอิดไคส์เบดในการเกิดปฏิกิริยาออกซิคลอรีเนชันเพื่อผลิต 1,2-ไดคลอโรอีเทน ส่วนของปฏิกรณ์ที่มีท่อหล่อเย็นถูกนำมาใช้ในการจำลองแบบเนื่องจากปฏิกิริยาเกือบทั้งหมดเกิดที่ส่วนนี้ ค่าที่ได้จากการทำนายของแบบจำลองนี้มีความสอดคล้องเป็นอย่างดีกับข้อมูลจากทางโรงงาน และผลที่ได้จากการจำลองแบบให้ข้อมูลได้มากขึ้นเกี่ยวกับพฤติกรรมทางพลศาสตร์ในปฏิกรณ์ฟลูอิดไคส์เบดและสามารถปรับอุณหภูมิของท่อหล่อเย็น, สัดส่วนการป้อนสารเข้า, และอื่นๆ เพื่อใช้เป็นเครื่องมือสำหรับปรับปรุงสถานะในการดำเนินการของโรงงานจริงได้

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

$A_{\alpha\beta}$	พื้นที่ผิวสัมผัสต่อหนึ่งหน่วยปริมาตร, m^2 / m^3
C_C	ความเข้มข้นของคิวบิคคลอไรด์ในตัวเร่งปฏิกิริยา
C_E	ความเข้มข้นของเอทิลีนในเฟสแก๊ส, mol/m^3
$C_{\varepsilon 1}$	ค่าคงที่ของแบบจำลองความปั่นป่วน $k - \varepsilon$ ($=1.44$)
$C_{\varepsilon 2}$	ค่าคงที่ของแบบจำลองความปั่นป่วน $k - \varepsilon$ ($=1.92$)
C_μ	ค่าคงที่ของแบบจำลองความปั่นป่วน $k - \varepsilon$ ($=0.09$)
c	ค่าโมดูลัสของการกระทบ
$c_{\alpha\beta}^{(d)}$	ค่าสัมประสิทธิ์แรงจุด, kg/s
d_β	เส้นผ่าศูนย์กลางเฉลี่ยของเฟสที่มีการกระจายตัว, m
d_p	เส้นผ่าศูนย์กลางของอนุภาค, m
K_a	ค่าคงที่การดูดซับที่สภาวะสมดุล
k	ค่าพลังงานจลน์สาธิตของการปั่นป่วนต่อหนึ่งหน่วยมวล, m^2/s^2
k_r	ค่าคงที่ของอัตราการเกิดปฏิกิริยา, $1/\text{s}$
r	อัตราการเกิดปฏิกิริยา, $\text{kg mol} / \text{s m}^2$
M_α	แรงทั้งหมดที่กระทำบนเฟส α ซึ่งได้รับมาจากเฟสอื่นๆ
$M_{\alpha\beta}$	การถ่ายเทโมเมนตัมระหว่างเฟสจากเฟส α ไปยังเฟส β
P_f	ความดันของเฟสของไหล, $\text{kg} / \text{m s}^{-2}$
P_k	การสร้างความเค้นของการปั่นป่วน, $\text{kg} / \text{m s}^{-3}$
P_s	ความดันของแข็ง, $\text{kg} / \text{m s}^{-2}$
Q_α	การถ่ายเทความร้อนจากระหว่างเฟสจากเฟส α ไปยังเฟสอื่นๆ
r_α	สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟส α
r_c	สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสที่มีความต่อเนื่อง
r_d	สัดส่วนโดยปริมาตรของเฟสที่มีการกระจายตัว
G_0	ค่าโมดูลัสยืดหยุ่นที่สภาวะอ้างอิง
r_{sm}	ค่าพารามิเตอร์ของการบรรจุสูงสุด
S_E	แหล่งกำเนิดพลังงาน, $\text{kg} / \text{m s}^3$
S_M	แหล่งกำเนิดโมเมนตัมที่เกิดจากแรงที่กระทำภายนอกวัตถุ, $\text{kg} / \text{m}^2 \text{s}^2$
S_{MS}	แหล่งกำเนิดมวล, $\text{kg} / \text{m}^3 \text{s}$
T	อุณหภูมิ, K
U_α	ความเร็วของเฟส α

U_β	ความเร็วของเฟส β
Y_A	สัดส่วนโดยมวลของ A ในของไหล
$\Gamma_{\alpha\beta}$	การแพร่จากเฟส α ไปยังเฟส β , kg / m s
$\Gamma_{\beta\alpha}$	การแพร่จากเฟส β ไปยังเฟส α , kg / m s
ε	อัตราการลดลงของพลังงานจลน์ของความปั่นป่วน, m^2/s^3
λ_α	ค่าการนำความร้อนของเฟส α , kg m/s ³ K
μ	ค่าความหนืด, kg / m s
μ_c	ความหนืดของเฟสที่ต่อเนื่อง, kg / m s
μ_t	ความหนืดของการไหลแบบปั่นป่วน, kg/m s
ρ	ความหนาแน่น, kg / m ³
σ_ε	ค่าคงที่ความปั่นป่วนของแบบจำลอง $k - \varepsilon$ ($= 1.3$)
τ	ความเค้น, kg / m s ²
τ_s	ความเค้นที่เกิดจากการชนกันของอนุภาค, kg / m s ²
$\tau_{\alpha\beta}$	อัตราการไหลของมวลต่อหนึ่งหน่วยปริมาตรจากเฟส α ไปยังเฟส β

กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบคุณโครงการทุนอุดหนุนและส่งเสริมวิทยานิพนธ์ระดับปริญญาโท-เอก บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ที่ให้การสนับสนุนทุนสำหรับงานวิจัยนี้

บรรณานุกรม

- Al-Zahrani, S.M., A. M. Aljodia, and K. M. Wagialla. 2001. Modeling and simulation of 1,2-dichloroethane production by ethylene oxychlorination in fluidized-bed reactor. **Chemical Engineering Science**. 56: s621-s626.
- Bouillard, J. X., R. W. Lyczkowski, and D. Gidaspow. 1989. Porosity Distribution in a Fluidised Bed with an Immersed Obstacle. **AIChE J.**, 35: s908-s922.
- El-Hawagi, M.M. and El-Rifai M.A. 1988. Mathematical modeling of catalytic fluidized-bed reactors-I. The multiphase three-phase model. **Chemical Engineering Science**. 43,9: s2477-s2486.
- Gidaspow, D., 1994. **Multiphase flow and fluidization : Continuum kinetic theory descriptions**. NewYork: Academic Press.
- Neri, A., & Gidaspow, D., 2000. Riser hydrodynamics: Simulation using kinetic theory. **AIChE J**, 46: s52-s67.
- Radade, V.V., 2002. **Computational flow modeling for chemical reactor engineering**. USA: Academic Press.
- Ranade, V.V., 1996. Pushing the limits of existing reactor hardware using CFD. **Current Sci**. 77: 1303-1310.
- Wachi, W. and Y. Asai, 1994. Kinetics of 1,2 Dichloroethane formation from ethylene and cupric chloride. **Industrial Engineering and Chemistry Research**. 33: s259-s264.