



การออกแบบโปรแกรมสำเร็จรูปของถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง เพื่อหา
สภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ HDA ในไมโครซอฟต์เอกซ์เซล โดยใช้
แมโครและ VBA โปรแกรม

CSTR reactor design program for HDA process optimization in
Microsoft Excel by using macro and VBA program

นางสาวนิภัทรา ศรีอ่อนดี

รหัส 57365676

นางสาวสุภัทรา กลิ่นจันทร์

รหัส 57365867

ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาอุตสาหกรรม
คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร
ปีการศึกษา 2560



ใบรับรองปริญญาานิพนธ์

ชื่อหัวข้องานวิจัย การออกแบบโปรแกรมสำเร็จรูปของถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง เพื่อหา
สภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ HDA ในไมโครซอฟต์แวร์เอกซ์เซล โดย
ใช้แมโครและ VBA โปรแกรม

ผู้ดำเนินงานวิจัย นางสาวนิกิถรา ศรีอ่อนดี รหัส 57365676
นางสาวสุภัทรา กลิ่นจันทร์ รหัส 57365867


ที่ปรึกษางานวิจัย ดร. สุธิพงษ์ ทรงประวัติน


สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี

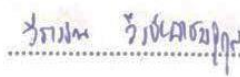
ภาควิชา วิศวกรรมอุตสาหกรรม

ปีการศึกษา 2560

คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร อนุมัติให้ปริญญาานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการ
การศึกษาตามหลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี


.....ที่ปรึกษางานวิจัย
(ดร. สุธิพงษ์ ทรงประวัติน)


.....กรรมการ
(ผศ.ดร. อิศราวุธ ประเสริฐสังข์)


.....กรรมการ
(ดร. วีรวรรณ วีรชัยพิเชษฐ์กุล)

ชื่อหัวข้องานวิจัย	การออกแบบโปรแกรมสำเร็จรูปของถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ HDA ในไมโครซอฟต์เอกซ์เซล โดยใช้แมโครและ VBA โปรแกรม		
ผู้ดำเนินงานวิจัย	นางสาวนิภัทรา ศรีอ่อนดี	รหัส	57365676
	นางสาวสุภัทรา กลิ่นจันทร์	รหัส	57365867
ที่ปรึกษางานวิจัย	ดร. สุทธิพงษ์ ทรงประวัตติ		
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี		
ภาควิชา	วิศวกรรมอุตสาหกรรม		
ปีการศึกษา	2560		

บทคัดย่อ

งานวิจัยฉบับนี้ได้ทำการเขียนโปรแกรมใน Microsoft Excel โดยใช้แมโครและ VBA โปรแกรม เพื่อศึกษากระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีน โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องสำหรับกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลูอีน

ในการดำเนินงานวิจัยทางคณะผู้จัดทำงานวิจัยได้กำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหาเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง จากนั้นทำการออกแบบโปรแกรมโดยมีการระบุข้อมูลเข้า โดยให้โปรแกรมแสดงผลลัพธ์เพื่อเป็นการระบุข้อมูลออก และจากนั้นได้ทำการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม ทำการใส่ข้อมูลที่ถูกต้องลงไปโปรแกรมเพื่อดูว่าผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรมถูกต้องตามความเป็นจริง หรือตรงตามที่ต้องการหรือไม่ เมื่อผ่านขั้นตอนการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรมแล้ว จึงได้จัดทำคู่มือแนะนำการใช้งานโปรแกรม เพื่อให้ผู้ใช้งานโปรแกรมใช้งานได้ง่ายและสะดวกมากยิ่งขึ้น ซึ่งในการวิเคราะห์ผลและปัญหา ทำให้ได้สภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องของกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลูอีน ที่อุณหภูมิ 972 เคลวิน ความดัน 34 บาร์ และได้ร้อยละ Conversion สูงสุดเท่ากับ 86 โดยปริมาตรที่เหมาะสมเท่ากับ 3,517 ลูกบาศก์เมตร

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี เพราะได้รับความช่วยเหลืออย่างยิ่งจากท่าน ดร.สุทธิพงษ์ ทรงประวัติ อาจารย์ที่ปรึกษางานวิจัย และคณะอาจารย์ประจำสาขาวิศวกรรมเคมี มหาวิทยาลัยนเรศวรทุกท่าน ที่ได้ให้วิชาความรู้ คำแนะนำ คำปรึกษา แนะนำแนวทางการแก้ไขปัญหา และข้อคิดเห็นต่างๆ ในการดำเนินงานวิจัยด้วยดีมาโดยตลอด

ท้ายนี้ คณะผู้จัดทำงานวิจัยขอกราบขอบพระคุณ บิดา - มารดา ซึ่งคอยสนับสนุนด้านการเงิน และให้กำลังใจแก่คณะผู้จัดทำงานวิจัยเสมอมาจนสำเร็จการศึกษา รวมทั้งขอขอบคุณเพื่อนๆ ในสาขาวิชาวิศวกรรมเคมีทุกคนที่คอยให้กำลังใจ ให้คำปรึกษา และความช่วยเหลือด้วยดีตลอดมา



คณะผู้จัดทำงานวิจัย

นางสาวนิภัทรา ศรีอ่อนดี

นางสาวสุภัทรา กลิ่นจันทร์

พฤษภาคม 2561

สารบัญ

	หน้า
ใบรับรองปริญญาโท.....	ข
บทคัดย่อ.....	ค
กิตติกรรมประกาศ.....	ง
สารบัญ.....	จ
สารบัญตาราง.....	ฉ
สารบัญรูป.....	ญ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของวิจัย.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....	1
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย.....	2
1.4 สถานที่ในการดำเนินงานวิจัย.....	2
1.5 ระยะเวลาในการดำเนินงานวิจัย.....	2
1.6 ขั้นตอนของการดำเนินงานและแผนการดำเนินงาน.....	3
1.7 ผลที่คาดว่าจะได้รับ.....	4
บทที่ 2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	5
2.1 กระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีน.....	5
2.1.1 กระบวนการดีไฮโดรจีเนชัน (Dehydrogenation).....	5
2.1.2 กระบวนการดีไฮโดรไซคลิกเซชัน (Dehydrocyclization).....	5
2.1.3 กระบวนการดีอัลคิลเลชัน (Dealkylation).....	5
2.1.4 กระบวนการทรานส์แอลคิลเลชัน (Transalkylation).....	6
2.2 Kinetic factor.....	7
2.3 สมมติฐานของแบบจำลอง.....	8
2.4 ปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการ Hydrodealkylation.....	8

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.4.1 กฎอัตรา.....	8
2.4.2 สมบัติของสารตั้งต้น.....	9
2.4.3 ความเข้มข้นของสารตั้งต้น	9
2.4.4 พื้นที่ผิวของสารตั้งต้น.....	9
2.4.5 อุณหภูมิ.....	9
2.4.6 ตัวเร่งปฏิกิริยา.....	10
2.4.7 ตัวหน่วงปฏิกิริยา.....	10
2.5 ประเภทของเครื่องปฏิกรณ์ (Type of reactors).....	10
2.6 สมการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง.....	12
2.6.1 สมการสมดุลโมล	13
2.6.2 สมการสมดุลพลังงาน	14
2.6.3 ตารางปริมาณสารสัมพันธ์ (Stoichiometric Tables)	18
2.6.4 สมการของแก๊สสมบูรณ์แบบ (The Ideal Gas Equation)	19
2.7 โปรแกรม Microsoft Excel 2016.....	21
2.7.1 Macro Excel.....	21
2.7.2 Visual Basic for Applications: VBA.....	22
2.7.3 User form	24
2.7.4 Command Button	27
2.7.5 Goal seek	28
2.8 วิธีการตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม.....	29
2.8.1 ตรวจสอบด้วยตนเองหรือส่งผู้ชำนาญ (Self-Checking).....	29
2.8.2 ตรวจสอบด้วยโปรแกรมโดยใช้ข้อมูลทดสอบ (Test data).....	29
2.9 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	29

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 3 วิธีการดำเนินงานวิจัย ..	32
3.1 กำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหา (Analysis the problem).....	33
3.2 ออกแบบโปรแกรม (Design Program)	33
3.2.1 การระบุข้อมูลเข้า (Input).....	34
3.2.2 การระบุข้อมูลออก (Output).....	34
3.3 การเขียนโปรแกรม (Coding)	34
3.3.1 หน้าต่างเริ่มต้นโปรแกรม (Start).....	34
3.3.2 หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม (Reactor).....	35
3.3.3 หน้าต่างเลือกสารประกอบ (Select Component)	36
3.3.4 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยา (Add Reaction).....	37
3.3.5 หน้าต่าง Operating conditions	44
3.3.6 หน้าต่างแสดงผลลัพธ์เมื่อมีความผิดพลาด (Result Error)	45
3.4 ตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging)	46
3.4.1 สภาวะถึงปฏิกิริยถึงปฏิกิริยเคมีต่อเนื่อง.....	46
3.4.2 สภาวะและอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้า	46
3.4.3 อัตราการไหลเชิงโมลขาออก.....	46
3.4.4 Conversion.....	47
3.4.5 เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อน (Percentage Error).....	47
บทที่ 4 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง.....	48
4.1 ผลการทดลองจากการตรวจสอบข้อผิดพลาดของ	48
4.2 การวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion	49
4.3 การวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาตรถึงปฏิกิริย.....	50

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 5 บทสรุปและข้อเสนอแนะ	52
5.1 สรุปผลการดำเนินงาน.....	52
5.1.1 การศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมด้วยใช้ Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel บน Microsoft Excel 2016.....	52
5.1.2 การศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง.....	52
5.1.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ HDA ผ่านโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ในถังปฏิกรณ์เคมีแบบไหลต่อเนื่อง.....	52
5.2 ข้อเสนอแนะ.....	53
เอกสารอ้างอิง.....	54
ภาคผนวก ก.....	56
ภาคผนวก ข.....	62
ภาคผนวก ค.....	87
ประวัติคณะผู้จัดทำงานวิจัย.....	90

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
1.1 ขั้นตอนของการดำเนินงานและแผนการดำเนินงาน	3
2.1 ตารางแสดงการจำแนกลักษณะและการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์	10
2.2 ตารางปริมาณสารสัมพันธ์ (Stoichiometric Tables).....	18



สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
2.1 กระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีน.....	6
2.2 การทำงานของ Batch Reactor ในช่วงเวลาต่างๆ.....	11
2.3 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลและแบบถังกวนในอุดมคติ.....	12
2.4 การทำงานของ Fed-batch Reactor ในช่วงเวลาต่างๆ.....	12
2.5 CSTR Reactor.....	13
2.6 การเปิดหน้าต่าง Visual Basic for Applications.....	23
2.7 หน้าต่างการสร้าง Module.....	24
2.8 หน้าต่างการสร้าง Procedure.....	24
2.9 การตั้งชื่อ Procedure.....	24
2.10 การทดสอบโปรแกรม.....	25
2.11 การเปิดหน้าต่าง User form.....	25
2.12 หน้าต่างการสร้าง User form.....	25
2.13 หน้าต่าง User form1.....	26
2.14 หน้าต่าง UserForm1.....	26
2.15 หน้าต่าง Project Explorer.....	27
2.16 หน้าต่าง Properties.....	27
2.17 หน้าต่างการสร้าง Command Button.....	28
2.18 การสร้าง Command Button.....	28
2.19 หน้าต่างทำการวิเคราะห์แบบ What-If Analysis.....	29
2.20 หน้าต่าง Goal Seek.....	29
3.1 พังงานแสดงขั้นตอนการดำเนินโครงการ.....	32
3.2 พังงานแสดงขั้นตอนการออกแบบโปรแกรม (Design Program).....	33
3.3 หน้าต่างเริ่มต้นโปรแกรม (Start).....	34

สารบัญรูป (ต่อ)

รูปที่	หน้า
3.4 หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม (Reactor).....	35
3.5 หน้าต่างเลือกสารประกอบ (Select Component).....	36
3.6 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาแบบ Stoichiometry (Add Reaction).....	37
3.7 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาแบบ Kinetic (Add Reaction).....	41
3.8 หน้าต่างสภาวะการดำเนินงาน (Operating Condition)	44
3.9 หน้าต่างแสดงผลลัพธ์เมื่อมีความผิดพลาด (Result Error).....	45
4.1 ผลลัพธ์ตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม.....	48
4.2 ความสัมพันธ์ของปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion.....	49
4.3 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาตรถังปฏิกรณ์ ที่ขนาดถังปฏิกรณ์ 100-65,000 ลูกบาศก์เมตร.....	50
4.4 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาตรถังปฏิกรณ์ ที่ขนาดถังปฏิกรณ์ 100-4,000 ลูกบาศก์เมตร.....	51

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของวิจัย

ในปัจจุบันนี้ Microsoft Excel เข้ามามีบทบาทในชีวิตประจำวันมากยิ่งขึ้น โดยการประยุกต์ใช้ Microsoft Excel ทำให้ง่ายต่อการป้อนข้อมูล การแก้ไขข้อมูล สะดวกต่อการคำนวณ และการนำข้อมูลไปประยุกต์ใช้ สามารถจัดข้อมูลต่างๆ ได้อย่างเป็นหมวดหมู่และเป็นระเบียบมากยิ่งขึ้น นับว่าเป็นโปรแกรมที่ใช้งานง่ายและสามารถการแก้ปัญหาเช่นเดียวกันเมื่อเปรียบเทียบกับโปรแกรมอื่นๆ

งานวิจัยนี้ทางผู้จัดทำได้ทำการเขียนโปรแกรมขึ้นมาโดยใช้ Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel ในการสร้างโปรแกรมออกแบบถึงปฏิกรณ์แบบไหลต่อเนื่องที่สามารถประยุกต์ใช้กับสารตั้งต้นในวัฏภาคของแก๊ส ที่อุณหภูมิและความดันมีการเปลี่ยนแปลงเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถึงปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง ซึ่งทางผู้จัดทำได้นำกระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอินมาใช้ในการศึกษา มีตัวแปรในการปฏิบัติการต่างๆ คือ อัตราการไหลโดยโมลของสารเข้าถึงปฏิกรณ์ (กิโลโมลต่อลิตร) อุณหภูมิ (เคลวิน) และความดัน (บาร์) โดยโปรแกรมการออกแบบถึงปฏิกรณ์จะแสดงผลลัพธ์ออกมาเป็น อัตราการไหลโดยโมลของสารออกถึงปฏิกรณ์ (กิโลโมลต่อลิตร) ปริมาตรของถึงปฏิกรณ์ (ลูกบาศก์เมตร) ความเข้มข้นของสารผลิตภัณฑ์ของปฏิกิริยาหลัก (โมลต่อลิตร) และ Conversion รวมทั้งวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion และ ปริมาตรของถึงปฏิกรณ์ ทางผู้จัดทำหวังว่าโครงการนี้จะมีประโยชน์สำหรับการออกแบบถึงปฏิกรณ์ที่เหมาะสม และสำหรับผู้ที่สนใจสามารถนำไปพัฒนาขึ้นใช้ในระดับโรงงานอุตสาหกรรมได้

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1.2.1 เพื่อศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมด้วย Macro และ VBA ใน Microsoft Excel 2016

1.2.2 เพื่อศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของถึงปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

1.2.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลูอิน ผ่านโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ในถึงปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

1.3 ขอบเขตของงานวิจัย

1.3.1 เขียนสมการทางคณิตศาสตร์สำหรับกระบวนการของถึงปฏิกิริยเคมีแบบต่อเนื่องผ่าน Macro program ใน Microsoft Excel 2016

1.3.2 ตรวจสอบความถูกต้อง โดยการเปรียบเทียบผลลัพธ์ ที่มาจากปัญหาอย่างง่ายและมีผลเฉลยแม่นยำ หรือจากผลการทดลองที่ได้มีผู้ทำมาแล้ว

1.3.3 หาสภาวะที่เหมาะสมในถึงปฏิกิริยเคมีแบบต่อเนื่องสำหรับกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลูอิน โดยมีปัจจัยดังต่อไปนี้

ตัวแปรต้น : อุณหภูมิ และความดัน

ตัวแปรตาม : conversion และปริมาตรของถึงปฏิกิริย

ตัวแปรควบคุม : อัตราการไหลโดยโมลของสารเข้าถึงปฏิกิริย (F_{A0})

1.4 สถานที่ในการดำเนินงานวิจัย

ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

1.5 ระยะเวลาในการดำเนินงานวิจัย

ตั้งแต่เดือน ตุลาคม พ.ศ. 2560 ถึงเมษายน 2561



1.7 ผลที่คาดว่าจะได้รับ

1.7.1 สามารถนำโปรแกรมที่ได้ไปประยุกต์ใช้ในการออกแบบถึงปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องของสารตั้งต้นที่อยู่ในวัฏภาคแก๊ส

1.7.2 ได้รับความรู้เกี่ยวกับการเขียนโปรแกรมบน Microsoft Excel 2016

1.7.3 สำหรับผู้ที่สนใจสามารถนำโปรแกรมไปพัฒนาต่อได้



บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

เนื้อหาในบทนี้ได้แบ่งรายละเอียดที่เกี่ยวข้องกับหลักการและทฤษฎีที่ใช้ในการพัฒนาโครงการออกเป็นส่วนต่างๆ หลายส่วน ได้แก่ การอธิบายกระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอิน ปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการ Hydrodealkylation สมการที่ใช้ในการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับการใช้งานบน Macro excel และงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง เป็นต้น ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

2.1 กระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอิน

กระบวนการนี้ใช้กระบวนการเปลี่ยนโครงสร้างโมเลกุล (Reforming) เป็นกระบวนการเปลี่ยนโครงสร้างสารไฮโดรคาร์บอนจากขั้นตอนการแตกสลายเป็นผลิตภัณฑ์ตามที่ต้องการ เช่น สารอะโรมาติกส์ต่างๆ หมายถึง สารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่มีเบนซีน (C_6H_6) เป็นองค์ประกอบ เช่น เบนซีน โทลูอิน ไซลีน เป็นต้น โดยอาศัยความร้อน ความดัน และตัวเร่งปฏิกิริยาเข้าร่วมในการผลิต เมื่อสารวัตถุดิบ ผ่านจากกระบวนการแตกโมเลกุลมาจะผ่านกระบวนการเปลี่ยนโครงสร้างโมเลกุล ซึ่งสามารถทำได้หลายวิธีดังนี้ [1]

2.1.1 กระบวนการดีไฮโดรจีเนชัน (Dehydrogenation)

เป็นกระบวนการดึงสารไฮโดรเจนออกจากโครงสร้างโมเลกุลของสารไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว เพื่อเปลี่ยนเป็นสารไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว เพื่อเปลี่ยนเป็นสารอะโรมาติกส์ เช่น การเปลี่ยนสารพาราฟินส์เป็นอะโรมาติกส์ เป็นต้น [1]

2.1.2 กระบวนการดีไฮโดรไซคลิเซชัน (Dehydrocyclization)

เป็นกระบวนการดึงสารไฮโดรเจนออกจากโครงสร้างโมเลกุลของสารไฮโดรคาร์บอนแบบไซ่ตรง เพื่อเปลี่ยนสารอะโรมาติกส์ เช่น การเปลี่ยนสารอะโรมาติกส์ เป็นต้น [1]

2.1.3 กระบวนการดีอัลคิลเลชัน (Dealkylation)

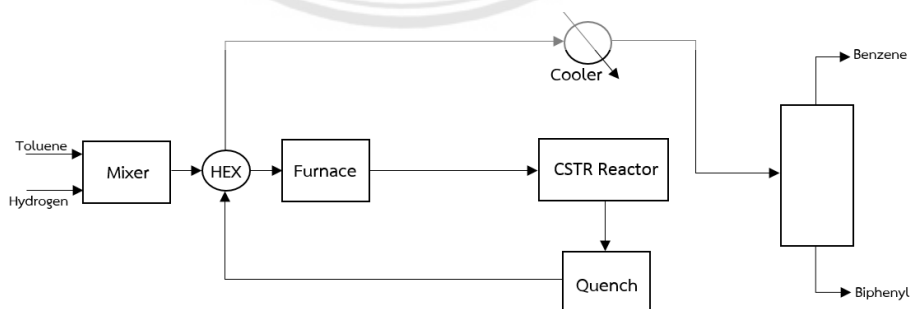
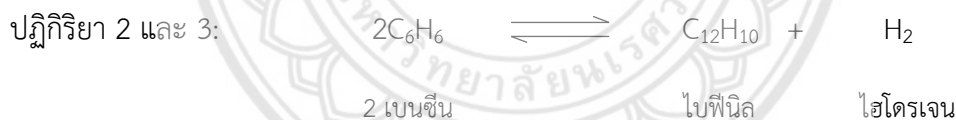
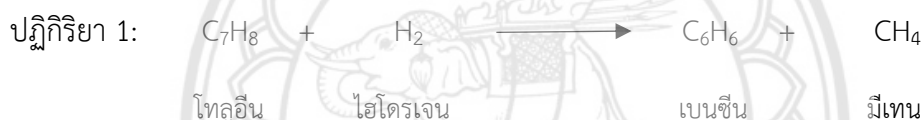
เป็นกระบวนการดึงหมู่อัลคิล (Alkyl) ออก เช่น การดึงหมู่อัลคิล (Alkyl) ของเพื่อเปลี่ยนสารเบนซีนไปเป็นโทลูอิน เป็นต้น [1]

2.1.4 กระบวนการทรานส์แอลคิลเลชัน (Transalkylation)

เป็นกระบวนการที่สารสองโมเลกุลแตกตัวและรวมตัวในเวลาเดียวกัน โดยอาศัยตัวเร่งปฏิกิริยา แล้วได้สารใหม่ที่มีขนาดโมเลกุลที่อาจเล็กหรือใหญ่กว่าเดิม เช่น การ Transalkylation ของสารโทลูอีน ได้เป็นเบนซีน และสารไซลีน เป็นต้น

กรรมวิธีการผลิตเบนซีนในทางอุตสาหกรรมมีหลายวิธีเช่น ปฏิกิริยา Catalytic reforming ของน้ำมันปิโตรเลียม การเผาและกลั่นถ่านหิน หรือ ปฏิกิริยาดีอัลคิลเลชัน (Dealkylation) ของสารโทลูอีน ซึ่งในกระบวนการนี้ใช้กระบวนการปฏิกิริยาดีอัลคิลเลชัน (Dealkylation) โดยการเติมไฮโดรเจน (H_2) ในโทลูอีน (C_7H_8) เพื่อดึงมีเทน (CH_4) ออกมา เรียกว่า กระบวนการ Hydrodealkylation

กระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีนจะประกอบไปด้วยหน่วยผลิต 4 หน่วยดังนี้ ถึงปฏิกรณ์ 1 หน่วย แยก flash 1 หน่วย หอลดอุณหภูมิ 1 หน่วย และเตาเผา 1 หน่วย โดยมี สารตั้งต้นที่ใช้ในกระบวนการ คือ ไฮโดรเจน และโทลูอีน ได้ผลิตภัณฑ์ 2 ชนิด คือ เบนซีน (ผลิตภัณฑ์ที่ต้องการ) และไบฟีนิล (ผลิตภัณฑ์ข้างเคียง) ซึ่งมีปฏิกิริยาดังนี้ [2]



รูปที่ 2.1 กระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีน

ที่มา : Performance Evaluation of Heat Integrated and Control Structures Of Hydrodealkylation (HDA) Plant Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Chulalongkorn University

กระบวนการเริ่มต้นจากการนำสารบริสุทธิ์โทลูอินซึ่งเป็นของเหลว และแก๊สไฮโดรเจน ป้อนเข้าสู่กระบวนการผสมและไปยังเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อน แล้วถูกส่งผ่านไปยังเตาเผา เพื่อเพิ่มอุณหภูมิให้เพียงพอต่อการเกิดปฏิกิริยาและจะได้สารทั้งสองอยู่ในสถานะแก๊ส จากนั้นป้อนเข้าสู่ถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง จะเกิดเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน ซึ่งสารที่ออกจากถังปฏิกรณ์จะนำไปถูกลดอุณหภูมิตั้งแต่เร็วเพื่อป้องกันการเปิดปฏิกิริยาข้างเคียงหรือปฏิกิริยาที่ไม่ต้องการ จากนั้นส่งเข้าเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนระหว่างกระบวนการเพื่อใช้ความร้อนส่วนที่เหลือในการเพิ่มอุณหภูมิให้สารป้อนใหม่ที่เข้ามาในกระบวนการเริ่มต้น ก่อนส่งผ่านเครื่องทำความเย็นเพื่อควบคุมอุณหภูมิให้เหมาะสมต่อการแยกในหอแยกแฟลช โดยไอที่ด้านบน จะประกอบไปด้วยไฮโดรเจนกับมีเทน ส่วนของเหลวที่ออกด้านล่างจะเป็นสารผลิตภัณฑ์ที่ต้องการก็คือ เบนซีน และสารผลิตภัณฑ์ข้างเคียงก็คือ ไบฟีนิล ซึ่งอาจมีสารอื่นผสมด้วย ได้แก่ มีเทน โทลูอินที่เป็นผลมาจากการทำปฏิกิริยาไม่สมบูรณ์ [2]

2.2 Kinetic factor [3]

$$r_1 = 3.6858 \times 10^6 \exp\left(-\frac{2.5616 \times 10^4}{T}\right) P_T P_H^{0.5} \quad (2.1)$$

$$r_2 = 0.62717 \exp\left(-\frac{1.5362 \times 10^4}{T}\right) P_B^2 \quad (2.2)$$

$$r_3 = 0.08124 \exp\left(-\frac{1.2237 \times 10^4}{T}\right) P_{Bi} P_H \quad (2.3)$$

$$E_1 = 91,556$$

$$E_2 = 54,913$$

$$E_3 = 43,742$$

เมื่อ

$$r_1, r_2 \text{ และ } r_3 \quad \text{คือ} \quad \text{อัตราการเกิดปฏิกิริยาของปฏิกิริยา 1 2 และ 3} \quad \left(\frac{\text{lbmole}}{\text{min} \cdot \text{ft}^3}\right)$$

$$E_1, E_2 \text{ และ } E_3 \quad \text{คือ} \quad \text{พลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยา 1 2 และ 3} \quad \left(\frac{\text{BTU}}{\text{lbmole}}\right)$$

P_T, P_H, P_B และ P_D คือ ความดันย่อยของโทลูอิน ไฮโดรเจน เบนซีน และไบฟีนิล

(psia)

R	คือ ค่าคงที่ของแก๊ส	$\left(\frac{BTU}{lbmole \cdot K} \right)$
T	คือ อุณหภูมิ	(Kelvin)

2.3 สมมติฐานของแบบจำลอง

2.3.1 ไม่พิจารณาเครื่องผสม เครื่องแลกเปลี่ยนความร้อน เตาเผา หอลดอุณหภูมิ เครื่องหล่อเย็น และหอแยกเฟลซ

2.3.2 ใช้ถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

2.3.3 ไม่พิจารณาการถ่ายเทความร้อน (Adiabatic) งานที่เกี่ยวข้อง และตัวเร่งปฏิกิริยา

2.3.4 อัตราการไหลโดยโมลของสารเข้าถังปฏิกรณ์ (F_{A0}) คงที่

2.3.5 สารตั้งต้นที่ใช้อยู่ในสถานะแก๊ส และเป็นกระบวนการผสมที่สมบูรณ์แบบ (Perfect Mixing)

2.3.6 สถานะดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา (Steady State)

2.4 ปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการ Hydrodealkylation

ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นนั้นบางปฏิกิริยาเกิดขึ้นเร็ว บางปฏิกิริยาเกิดขึ้นช้า ซึ่งขึ้นอยู่กับปัจจัยดังต่อไปนี้

2.4.1 กฎอัตรา

กฎอัตราของปฏิกิริยา เป็นสมการแสดงความสัมพันธ์ของอัตราการเกิดปฏิกิริยากับค่าคงที่ปฏิกิริยาและค่าความเข้มข้นของสารต่างๆ ที่เกี่ยวข้องกักฎอัตราการเกิดปฏิกิริยา



$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A^a C_B^b \quad (2.4)$$

จากสมการปฏิกิริยาเคมีข้างต้น จะพบว่า สาร A ปริมาณ a โมล ทำปฏิกิริยาพอดีกับสาร B ปริมาณ b โมล เกิดเป็นสาร C และ D อย่างละ c และ d โมล ตามลำดับ ซึ่งเรียกสาร A และ B เป็นสารตั้งต้น ส่วนสาร C และ D เป็นผลิตภัณฑ์ สำหรับค่า a, b, c, d เรียกว่าสัมประสิทธิ์ปริมาณสารสัมพันธ์ (Stoichiometric Coefficients)

สำหรับสาร A และสาร B จะพบว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาจะมีค่าติดลบ เนื่องจากในระหว่างปฏิกิริยาความเข้มข้นของสาร A และสาร B มีค่าลดลง ส่วนสาร C และสาร D มีค่าเพิ่มขึ้น เนื่องจากในระหว่างทำปฏิกิริยาความเข้มข้นของสาร C และสาร D มีค่าเพิ่มขึ้น [4]

2.4.2 สมบัติของสารตั้งต้น

สารแต่ละชนิดมีสมบัติต่างกัน จึงมีความไวต่อการเกิดปฏิกิริยาต่างกันด้วย เช่น แมกนีเซียมสามารถทำปฏิกิริยากับสารละลายกรดและเกิดเป็นแก๊สไฮโดรเจนได้อย่างรวดเร็ว แต่แมกนีเซียมจะทำปฏิกิริยากับออกซิเจนได้ช้า หรือโลหะโซเดียมทำปฏิกิริยากับน้ำเย็นได้เร็วมาก ขณะที่โลหะแมกนีเซียมจะทำปฏิกิริยากับน้ำเย็นได้ช้า แต่จะเกิดเร็วขึ้นเมื่อทำปฏิกิริยากับน้ำร้อน เป็นต้น [4]

2.4.3 ความเข้มข้นของสารตั้งต้น

หากสารตั้งต้นมีความเข้มข้นมาก ปฏิกิริยาจะเกิดเร็ว เนื่องจากความเข้มข้นของสารมากจะมีอนุภาคของสารอยู่รวมกันอย่างหนาแน่น อนุภาคของสารจึงมีความถี่ในการชนมากขึ้น ส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาได้รวดเร็ว ตรงกันข้ามกันหากสารตั้งต้นมีความเข้มข้นน้อย ปฏิกิริยาจะเกิดได้ช้า เนื่องจากอนุภาคของสารจึงมีโอกาสชนกันได้น้อยลง [4]

2.4.4 พื้นที่ผิวของสารตั้งต้น

พื้นที่ผิวของสารตั้งต้นจะมีผลต่อปฏิกิริยาเคมีแบบสารตั้งต้นมีสถานะเป็นของแข็งกับสารอีกชนิดหนึ่งที่มีสถานะเป็นของเหลว เนื่องจากการเพิ่มพื้นที่ผิวที่เพิ่มขึ้นจะทำให้ของแข็งมีพื้นที่สัมผัสกับของเหลวมากขึ้น การเกิดปฏิกิริยาจะเกิดได้เร็วขึ้น [4]

2.4.5 อุณหภูมิ

อุณหภูมิหรือพลังงานความร้อน จะผลต่อพลังงานภายในสาร โดยการเพิ่มอุณหภูมิจะเป็นการเพิ่มพลังงานจลน์ให้แก่อนุภาคของสาร ทำให้อนุภาคของสารเคลื่อนที่ได้เร็วขึ้น จึงช่วยเพิ่มโอกาส

ในการชนกันของอนุภาคมากขึ้น การเพิ่มพลังงานให้แก่สารจะช่วยทำให้สารมีพลังงานภายในมากกว่า พลังงานก่อกัมมันต์จึงทำให้เกิดปฏิกิริยาได้เร็วขึ้น [4]

2.4.6 ตัวเร่งปฏิกิริยา

ตัวเร่งปฏิกิริยา คือ สารเคมี หรือโลหะที่เติมลงไปในปฏิกิริยาแล้ว ทำให้เกิดปฏิกิริยาเกิดได้เร็วขึ้น หรือทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น แต่เมื่อสิ้นสุดปฏิกิริยา ตัวเร่งปฏิกิริยาเหล่านี้ยังคงมีสมบัติทางเคมีเหมือนเดิมและมีปริมาณเท่าเดิม [4]

2.4.7 ตัวหน่วงปฏิกิริยา

ตัวหน่วงปฏิกิริยา คือ สารเคมี หรือโลหะที่เติมลงไปในปฏิกิริยาแล้วทำให้ปฏิกิริยาเกิดช้าลง หรือมีผลยับยั้งปฏิกิริยา แต่เมื่อสิ้นสุดปฏิกิริยา ตัวหน่วงปฏิกิริยายังคงมีสมบัติทางเคมีเหมือนเดิมและมีปริมาณเท่าเดิม [4]

2.5 ประเภทของเครื่องปฏิกรณ์ (Type of reactors)

ในอุตสาหกรรมเคมี มีเครื่องปฏิกรณ์หลายชนิด ซึ่งมีเครื่องปฏิกรณ์ที่นิยมใช้ คือ แบบกะ (Batch Reactor) แบบต่อเนื่อง (CSTR Reactor) แบบไหลต่อเนื่อง (Plug-Flow Reactor) และแบบเฟดแบทช์ หรือแบบเซมิแบทช์ (Fed-Batch or Semi-Batch Reactor) ซึ่งแสดงในตารางที่ 2.1 [5]

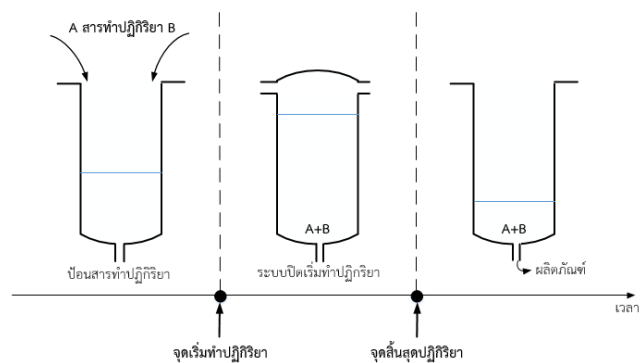
ตารางที่ 2.1 ตารางแสดงการจำแนกลักษณะและการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์

การทำงาน (Operation)	ลักษณะการทำงาน	ชนิดถังปฏิกรณ์	ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม
แบบกะ (Batch) หรือไม่ต่อเนื่อง	สารตั้งต้นทั้งหมดถูกป้อนเข้าไปในถังปฏิกรณ์ แล้วจึงเริ่มทำปฏิกิริยา เมื่อเสร็จสิ้นปฏิกิริยาตามเวลาที่กำหนด จึงนำของผสม (สารตั้งต้นที่เหลืออยู่และผลิตภัณฑ์) ออกจากถังปฏิกรณ์ ดังรูปที่ 2.2	Batch	<ul style="list-style-type: none"> - มีโครงสร้างง่าย ๆ - กำลังการผลิตต่ำ - เหมาะกับอุตสาหกรรมขนาดเล็ก เช่น การหมักอุตสาหกรรมผสมสี

ตารางที่ 2.1 (ต่อ)

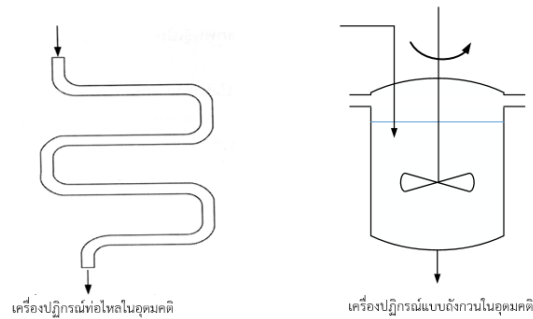
การทำงาน (Operation)	ลักษณะการทำงาน	ชนิดถังปฏิกรณ์	ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม
แบบต่อเนื่องและไหลต่อเนื่อง (Flow or Continuous)	สารทำปฏิกิริยาป้อนเข้าที่ทางเข้า เครื่องปฏิกรณ์อย่างต่อเนื่อง และผลิตภัณฑ์ที่ได้ไหลออกมาที่ทางออกดังรูปที่ 2.3	CSTR PFR	- ได้ผลผลิตอย่างต่อเนื่อง - กำลังการผลิตสูง - เหมาะกับอุตสาหกรรมขนาดใหญ่ เช่น การผลิตพลาสติก
แบบเฟดแบทช์ (Fed-batch or Semi-batch)	สารทำปฏิกิริยาตัวหนึ่งป้อนให้เข้าไปอยู่ในถังปฏิกรณ์ก่อน แล้วจึงป้อนสารทำปฏิกิริยาอีกตัวหนึ่งเข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง หรือป้อนเป็นระยะๆ ดังรูปที่ 2.4	Batch	- ควบคุมอุณหภูมิของระบบได้ง่าย - รักษาความเข้มข้นของสารตั้งต้นตัวหนึ่งให้มีค่าสูงตลอดเวลาทำให้ได้ผลิตภัณฑ์มากขึ้น

ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ



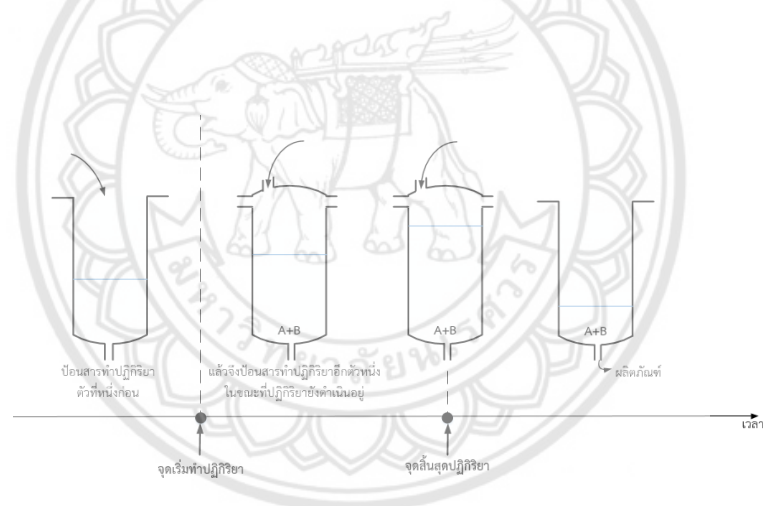
รูปที่ 2.2 การทำงานของ Batch Reactor ในช่วงเวลาต่างๆ

ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ



รูปที่ 2.3 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลและแบบถังกวนในอุดมคติ

ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ



รูปที่ 2.4 การทำงานของ Fed-batch Reactor ในช่วงเวลาต่างๆ

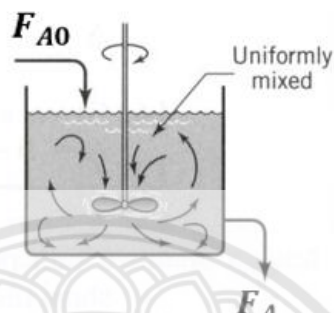
ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

2.6 สมการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

สมการการออกแบบถังปฏิกรณ์ คือ สมการที่นำไปสู่การคำนวณว่าเครื่องปฏิกรณ์ควรมีปริมาตรเท่าไร เพื่อให้ได้ปริมาณของผลิตภัณฑ์ อัตราส่วนการเปลี่ยนแปลงของสารทำปฏิกิริยาและเพื่อกำหนดเงื่อนไขต่างๆ ในการทำงานของเครื่องปฏิกรณ์ [6, 7, 8]

2.6.1 สมการสมดุลโมล

อัตราการไหล ของสาร j เข้า สู่ระบบ	-	อัตราการไหล ของสาร j ออก จากระบบ	+	อัตราการเกิด ของสาร j ใน ระบบ	-	อัตราการใช้ ไปของสาร j ในระบบ	=	อัตราการสะสม ของสาร j ในระบบ
---	---	--	---	-------------------------------------	---	-------------------------------------	---	------------------------------------



รูปที่ 2.5 CSTR Reactor

$$F_{A0} - F_A + \int r_A dV = \frac{dN_A}{dt} \quad (2.5)$$

ในกรณี สถานะดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา

$$\frac{dN_A}{dt} = 0 \quad (2.6)$$

ดังนั้น

$$F_{A0} - F_A + r_A V = 0 \quad (2.7)$$

$$r_A V = F_A - F_{A0} \quad (2.8)$$

โดย

$$F_A = F_{A0}(1 - X) \quad (2.9)$$

$$F_A = F_{A0} - F_{A0}X \quad (2.10)$$

$$F_A - F_{A0} = -F_{A0}X \quad (2.11)$$

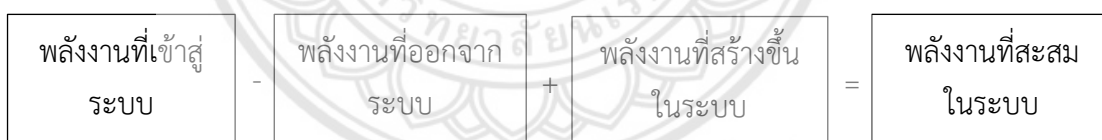
นำสมการ (2.11) แทนในสมการ (2.8) จะได้ว่า

$$r_A V = -F_{A0}X \quad (2.12)$$

ดังนั้น

$$V = \frac{F_{A0}X}{-r_A} \quad (2.13)$$

2.6.2 สมการสมดุลพลังงาน



$$\frac{d\left(\sum_{i=1}^n N_i H_i\right)}{dt} = \left(\sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0}\right) - \left(\sum_{i=1}^n F_i H_i\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \quad (2.14)$$

ค่าเอนทาลปีจากค่าความจุความร้อน

$$dH_i = C_{p_i} dT \quad (2.15)$$

$$H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{p_i} dT \quad (2.16)$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^n N_i C_{p_i} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} = \sum_{i=1}^n F_{i0} \left(H_i^0 + \int_{T_R}^{T_0} C_{p_i} dT \right) - \sum_{i=1}^n F_i \left(H_i + \int_{T_R}^T C_{p_i} dT \right) + \dot{Q} - \dot{W}_S \quad (2.17)$$

ในกรณี สถานะดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา จะได้ว่า

$$0 = - \left(\sum_{i=0}^n F_i H_i^0 - \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i^0 \right) - \left(\sum_{i=1}^n F_i \int_{T_R}^T C_{p_i} dT - \sum_{i=1}^n F_{i0} \int_{T_R}^{T_0} C_{p_i} dT \right) + \dot{Q} - \dot{W}_S \quad (2.18)$$

จำนวนโมลสารที่เปลี่ยนแปลงจากปฏิกิริยาเคมีเป็นไปตามความสัมพันธ์

$$F_i = F_{A0} (\Theta_i + \nu_i X) \quad (2.19)$$

และค่าความร้อนของปฏิกิริยาเคมี (Heat of Reaction) เป็นไปตามความสัมพันธ์

$$\Delta H_{Rxn}(T) = \sum_{i=1}^n \nu_i H_i(T) \quad (2.20)$$

$$0 = -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_{i0} \left(\int_{T_R}^T C_{p_i} dT - \int_{T_R}^{T_0} C_{p_i} dT \right) + F_{A0} X \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T \nu_i C_{p_i} dT \right) + \dot{Q} - \dot{W}_S \quad (2.21)$$

กำหนดให้

$$F_{i0} = F_{A0} \frac{F_{i0}}{F_{A0}} = F_{A0} \Theta_i \quad (2.22)$$

โดย

$$\Theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}} \quad (2.23)$$

$$0 = -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_{A0} \Theta_i \int_{T_0}^T C_{p_i} dT + F_{A0} X \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{p_i} dT \right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \quad (2.24)$$

ความร้อนของปฏิกิริยาเคมีที่อุณหภูมิใดๆ หาได้จากความสัมพันธ์

$$\Delta H_{Rxn}(T) = \Delta H_{Rxn}^0(T_R) + \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{p_i} dT \quad (2.25)$$

$$\Delta H_{Rxn}(T) = \Delta H_{Rxn}^0(T_R) + \Delta \hat{C}_p(T - T_R) \quad (2.26)$$

$$0 = -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - (F_{A0} \Theta_i \tilde{C}_{p_i}(T - T_0) + F_{A0} X \Delta \hat{C}_p(T - T_R)) + \dot{Q} - \dot{W}_s \quad (2.27)$$

$$0 = -F_{A0} X [\Delta H_{Rxn}^0 + \Delta \hat{C}_p(T - T_R)] - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}_{p_i}(T - T_0) + \dot{Q} - \dot{W}_s \quad (2.28)$$

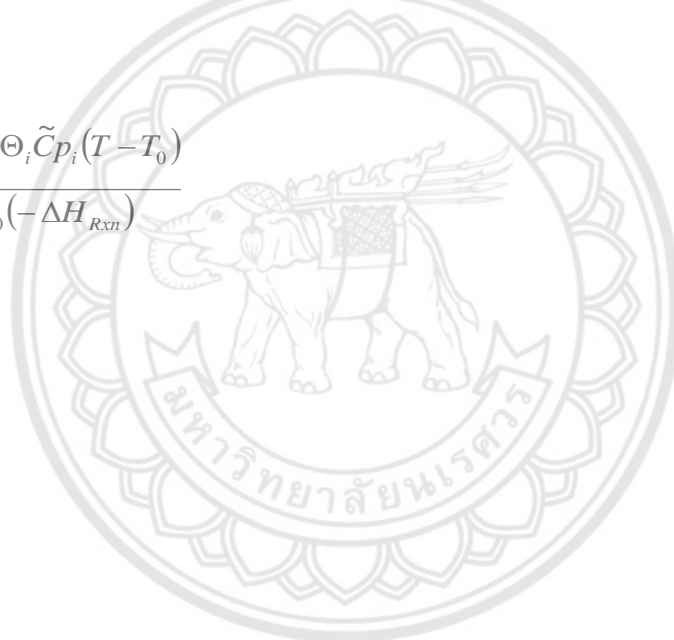
$$0 = F_{A0} X (-\Delta H_{Rxn}) - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_0) - \dot{Q} + \dot{W}_s \quad (2.29)$$

ดังนั้น

$$X = \frac{F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_0) - \dot{Q} + \dot{W}_s}{F_{A0} (-\Delta H_{Rxn})} \quad (2.30)$$

ในกรณีไม่พิจารณาการถ่ายเทความร้อน (Adiabatic) และงานที่เกี่ยวข้อง

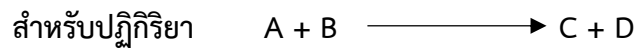
$$X = \frac{F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}_{p_i} (T - T_0)}{F_{A0} (-\Delta H_{Rxn})} \quad (2.31)$$



2.6.3 ตารางปริมาณสารสัมพันธ์ (Stoichiometric Tables)

ในเครื่องปฏิกรณ์เคมีจะมีการเปลี่ยนแปลงของสารจากสารหนึ่งไปเป็นอีกสารหนึ่ง การทำสมดุลโมล จึงต้องอาศัยปริมาณสารสัมพันธ์มาช่วยกำหนดความสัมพันธ์ ระหว่างสารทำปฏิกิริยาและผลิตภัณฑ์โดยใช้ค่า Conversion เป็นตัวแปร

ซึ่งตารางปริมาณสารสัมพันธ์เป็นตารางที่สามารถบอกค่าความเข้มข้นของสารต่างๆ หลังจากการทำปฏิกิริยาได้



ตารางที่ 2.2 ตารางปริมาณสารสัมพันธ์ (Stoichiometric Tables)

Species	mol in	mol reacted	mol out = mol in - mol reacted
A	F_{A0}	$-F_{A0}X$	$F_A = F_{A0}(1-X)$
B	F_{B0}	$-\left(\frac{b}{a}\right)F_{A0}X$	$F_B = F_{A0}(\Theta_B - v_B X)$
C	F_{C0}	$\left(\frac{c}{a}\right)F_{A0}X$	$F_C = F_{A0}(\Theta_C + v_C X)$
D	F_{D0}	$\left(\frac{d}{a}\right)F_{A0}X$	$F_D = F_{A0}(\Theta_D + v_D X)$

ที่มา : Instructional Materials 312303 Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design. Faculty of Engineering, Naresuan University

โดย

$$v_A = -\frac{a}{a} \quad v_B = -\frac{b}{a} \quad v_C = \frac{c}{a} \quad v_D = \frac{d}{a} \quad (2.32)$$

$$\Theta_A = \frac{F_{A0}}{F_{A0}} = 1 \quad \Theta_B = \frac{F_{B0}}{F_{A0}} \quad \Theta_C = \frac{F_{C0}}{F_{A0}} \quad \Theta_D = \frac{F_{D0}}{F_{A0}} \quad (2.33)$$

$$\Theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}} = \frac{C_{i0}v_0}{C_{A0}v_0} = \frac{C_{i0}}{C_{A0}} = \frac{y_{i0}}{y_{A0}} \quad (2.34)$$

2.6.4 สมการของแก๊สสมบูรณ์แบบ (The Ideal Gas Equation) [9]

$$Pv = FRT \quad (2.35)$$

ทางเข้าถังปฏิกรณ์

$$P_0v_0 = F_{T0}RT_0 \quad (2.36)$$

$$v_0 = \frac{F_{T0}RT_0}{P_0} \quad (2.37)$$

ทางออกถังปฏิกรณ์

$$Pv = F_TRT \quad (2.38)$$

$$v = \frac{F_TRT}{P} \quad (2.39)$$

นำสมการ (2.39) ทหารสมการ (2.37) จะได้ว่า

$$\frac{v}{v_0} = \left(\frac{F_T}{F_{T0}} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.40)$$

เมื่อ

$$\left(\frac{F_T}{F_{T0}} \right) = 1 + \varepsilon X \quad (2.41)$$

จะได้ว่า

$$\frac{v}{v_0} = (1 + \varepsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.42)$$

$$v = v_0 (1 + \varepsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.43)$$

นำสมการ (2.19) ทหารสมการ (2.43) จะได้ว่า

$$\frac{F_i}{v} = \frac{F_{A0} (\Theta_i + v_i X)}{v_0 (1 + \varepsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)} \quad (2.44)$$

$$\frac{F_i}{v} = \left(\frac{F_{A0}}{v_0} \right) \frac{(\Theta_i + v_i X)}{(1 + \varepsilon X)} \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.45)$$

$$C_i = \frac{C_{A0} (\Theta_i + v_i X)}{(1 + \varepsilon X)} \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.46)$$

เมื่อ

$$C_i = \frac{F_i}{v} \quad (2.47)$$

$$C_{A0} = \frac{F_{A0}}{v_0} \quad (2.48)$$

จัดรูปสมการ (2.35) จะได้ว่า

$$C_{A0} = \frac{P_{A0}}{RT_0} = \frac{y_{A0}P_0}{RT_0} \quad (2.49)$$

2.7 โปรแกรม Microsoft Excel 2016

โปรแกรม Microsoft Excel 2016 เป็นโปรแกรมประเภท Spreadsheet หรือโปรแกรมตารางงาน ซึ่งจะเก็บข้อมูลต่างๆ ลงบนแผ่นตารางงาน คล้ายกับการเขียนข้อมูลลงไปในสมุดที่มีการตีช่องตารางทั้งแนวนอนและแนวตั้ง ซึ่งช่องตารางแต่ละช่องจะมีชื่อประจำแต่ละช่อง ทำให้ง่ายต่อการป้อนข้อมูล การแก้ไขข้อมูล สะดวกต่อการคำนวณและการนำข้อมูลไปประยุกต์ใช้ สามารถจัดข้อมูลต่างๆ ได้อย่างเป็นหมวดหมู่และเป็นระเบียบมากยิ่งขึ้น [10]

2.7.1 Macro Excel

Macro Excel เป็นความสามารถหนึ่งที่ Microsoft Excel เปิดให้ผู้ที่ใช้งาน Microsoft Excel 2016 สามารถสั่งงาน Excel เพื่อทำงานอัตโนมัติได้ หรือมองเป็นเครื่องมือในการช่วยเขียนโปรแกรม Visual Basic for Application (VBA) โดยเพียงแค่ทำการบันทึกเท่านั้น ไม่จำเป็นต้องเรียนรู้การทำงานของระบบงานใน Excel ให้มากมาย [10]

2.7.1.1 ตัวอย่างของระบบงานทางธุรกิจที่สามารถใช้มาโครช่วยงานได้

- ก. การ Import Data หรือ Import Text file จากระบบงานอื่นเข้ามาอัตโนมัติ
- ข. การจัดรูปแบบงานอัตโนมัติ สามารถใช้งานมาโคร เพื่อจัดตารางให้สวย ทั้ง border, formatting, font, color ได้อย่างง่ายๆ
- ค. การปรับปรุงข้อมูลที่ได้จากระบบอื่นเช่น SAP, ERP แต่ยังไม่พร้อมใช้งาน ต้องลบคอลัมน์ เพิ่มคอลัมน์ที่ไม่ได้ใช้งาน เพื่อพร้อมใช้งาน
- ง. การทำการบันทึกข้อมูลจากแบบฟอร์มอัตโนมัติ
- จ. การออกรายงาน หรือ pivot table, pivot chart จากการคลิกปุ่มเพียงปุ่มเดียว
- ฉ. การ Export Data จาก Excel ไปยังระบบงานอื่นๆ [10]

2.7.1.2 ประโยชน์ของ Macro Excel

ก. ลดระยะเวลาในการทำงาน ให้งานซ้ำๆ เดิมที่จะต้องใช้เวลามาก ให้เหลือน้อยลง

ข. ลดกระบวนการทำงานที่ซับซ้อน โดยผู้ใช้ไม่จำเป็นต้องใช้งาน Excel ขั้นสูงก็สามารถทำงานที่ซับซ้อนได้ โดยรันมาโครที่บันทึกไว้ได้

ค. การพัฒนาไม่ซับซ้อนมาก ไม่ต้องมีความรู้ในการเขียนโปรแกรมมาก่อนก็สามารถที่จะเข้าถึงการใช้มาโครได้ [10]

2.7.1.3 ที่เก็บมาโคร

ก. Personal Macro Workbook สำหรับเก็บมาโครที่จะใช้ภายในเครื่องนั้น

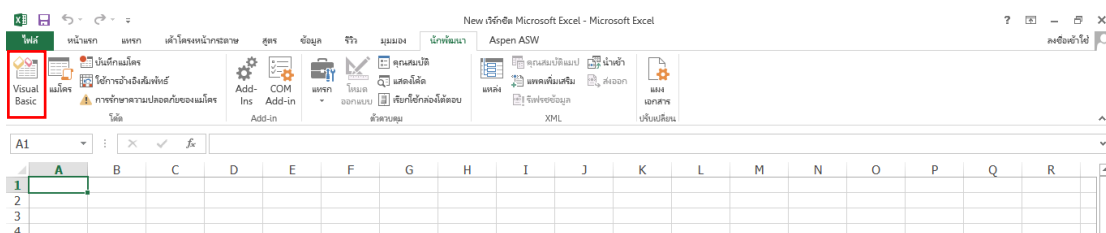
ข. New Workbook สำหรับให้ Workbook ใหม่ที่จะเรียกใช้ Macro ได้

ค. This Workbook เก็บในเอกสารนี้ โดยจะต้องบันทึกเป็นไฟล์แบบ Macro Enable (*.XLSM) [10]

2.7.2 Visual Basic for Applications: VBA

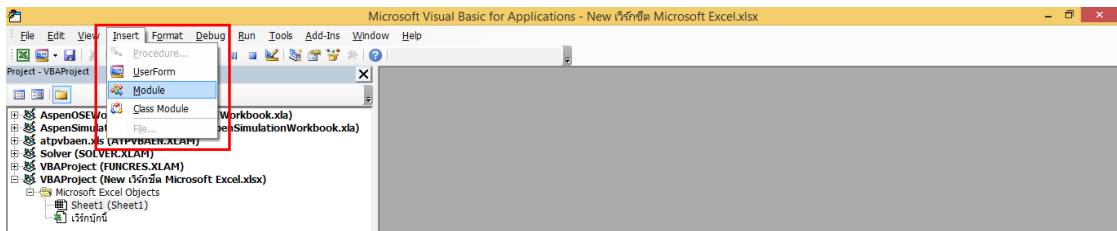
Visual Basic for Applications: VBA คือ การใช้ภาษา Visual Basic ในการเขียน Code ควบคุมโปรแกรมประยุกต์ต่างๆ เพื่อสั่งให้โปรแกรมทำงานตามความต้องการแบบอัตโนมัติ ซึ่งช่วยให้ผู้ใช้งานลดงานที่ซ้ำซ้อนลงได้ ซึ่งมีจุดเด่นในการวิเคราะห์ข้อมูล และการคำนวณที่ซับซ้อน อีกทั้งยังสามารถใช้ฟังก์ชันสำเร็จรูปได้อีกหลายอย่าง ทำให้สามารถสร้าง หรือพัฒนาโปรแกรม Microsoft Excel ได้ง่าย สะดวกและรวดเร็ว ลักษณะการใช้งานของ VBA มีดังนี้ [11]

(1) การเปิดใช้งาน Visual Basic for Applications ทำได้โดยคลิกที่นักพัฒนา (Developer) จากนั้นเลือก Visual Basic



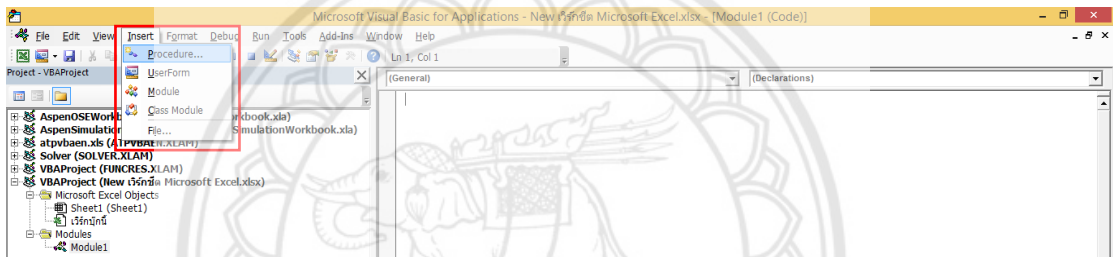
รูปที่ 2.6 การเปิดหน้าต่าง Visual Basic for Applications

(2) เมื่อหน้าต่าง Visual Basic for Applications ปรากฏขึ้นมา ให้คลิกที่ Insert จากนั้นเลือก Module ดังรูปที่ 2.7 แล้วจะปรากฏหน้าต่าง Module1 ขึ้นมา



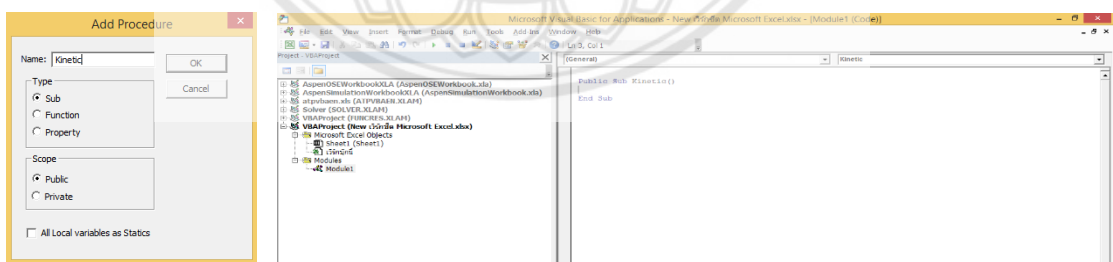
รูปที่ 2.7 หน้าต่างการสร้าง Module

(3) คลิกที่ Insert จากนั้นเลือก Procedure ดังรูปที่ 2.8 แล้วจะปรากฏหน้าต่าง Add Procedure ขึ้นมา




รูปที่ 2.8 หน้าต่างการสร้าง Procedure

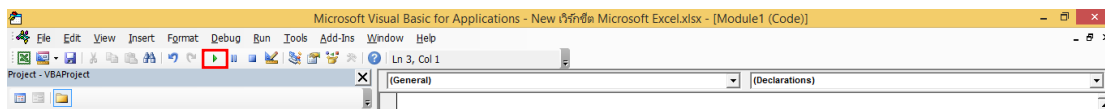
(4) ตั้งชื่อ Procedure คลิก OK จะปรากฏดังรูปที่ 2.9



รูปที่ 2.9 การตั้งชื่อ Procedure

(5) ทำการสร้าง Procedure

(6) หลังจากสร้าง Procedure เสร็จแล้ว ให้กลับไปหน้า Excel หลักเพื่อทดสอบโปรแกรม โดยการสั่งให้ Procedure ทำงานโดยคลิกที่หน้าต่าง  ของ VBA ดังรูปที่ 2.10

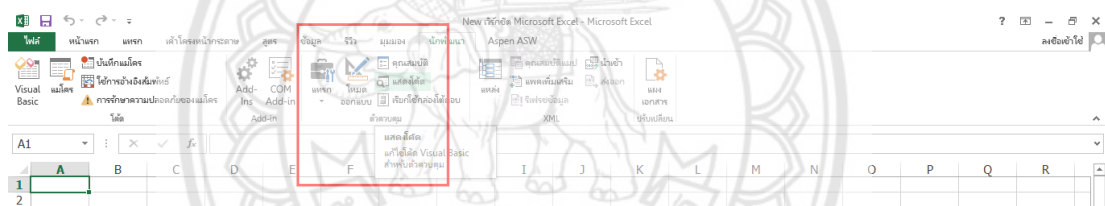


รูปที่ 2.10 การทดสอบโปรแกรม

2.7.3 User form

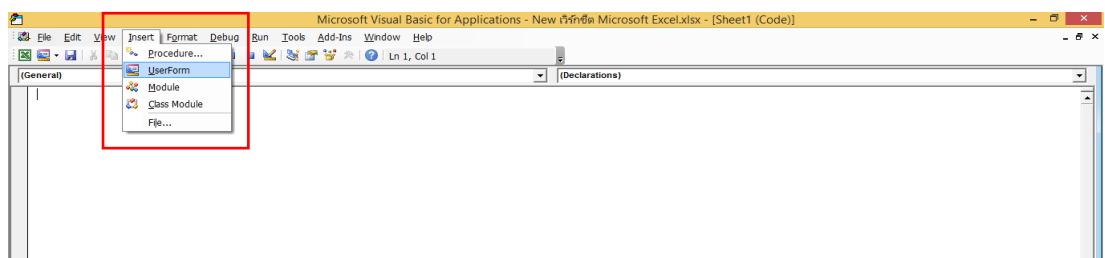
ส่วนสำคัญของการสร้างโปรแกรมอีกส่วนหนึ่งก็คือ การสร้างฟอร์ม เพื่อทำการติดต่อระหว่างโปรแกรมกับผู้ใช้งาน โดยการจัดหมวดหมู่ของเครื่องมือต่างๆ ที่เป็นองค์ประกอบของฟอร์มให้เป็นระเบียบเรียบร้อยจะช่วยให้โปรแกรมนั้นมีความน่าใช้ยิ่งขึ้น ในโปรแกรมเอกเซลนั้น เราสามารถสร้างฟอร์มขึ้นมาใช้งานได้ โดยมีขั้นตอนในการสร้าง ดังนี้ [11]

(1) การเปิดใช้งาน User form โดยการคลิกที่นักพัฒนา (Developer) จากนั้นเลือกแสดงโค้ด ดังรูปที่ 2.11



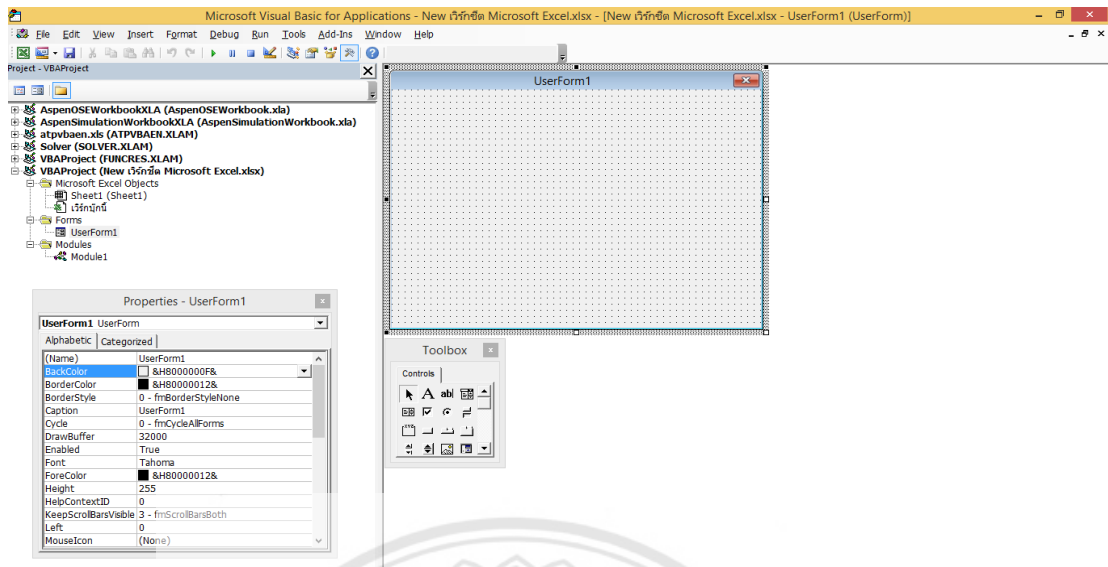
รูปที่ 2.11 การเปิดหน้าต่าง User form

(2) เมื่อหน้าจอแสดงโค้ดปรากฏขึ้น ให้คลิกเลือก Insert จากนั้นเลือก User form ดังรูปที่ 2.12 แล้วจะมีหน้าต่าง User form1 ปรากฏขึ้นมา



รูปที่ 2.12 หน้าต่างการสร้าง User form

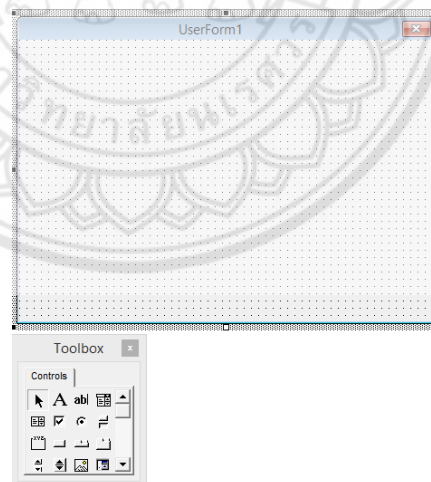
(3) หน้าต่าง UserForm1



รูปที่ 2.13 หน้าต่าง User form1

(4) หน้าต่าง User form1 ดังรูปที่ 2.13 มีส่วนประกอบดังนี้

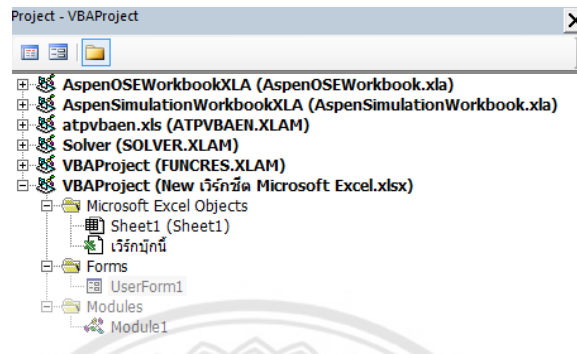
4.1) UserForm1



รูปที่ 2.14 หน้าต่าง UserForm1

4.2) Project Explorer

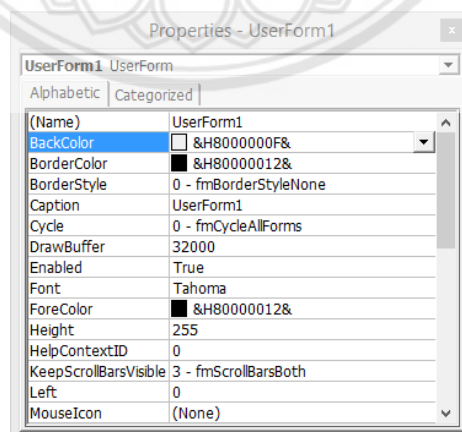
หน้าต่าง VBA Project เป็นส่วนที่ใช้สำหรับจัดการเกี่ยวกับโปรเจกต์ ทำหน้าที่แสดงส่วนประกอบต่างๆ ที่มีอยู่ในโปรเจกต์ เช่น สมุดงาน Forms Module ซึ่งสามารถเลือกใช้งานได้ โดยการคลิกเลือกได้



รูปที่ 2.15 หน้าต่าง Project Explorer

4.3) Properties window

หน้าต่างคุณสมบัติ (Properties) เป็นส่วนที่ใช้สำหรับกำหนดคุณสมบัติต่างให้กับวัตถุที่ถูกเลือก ดังนั้นหน้าต่างนี้จะมีองค์ประกอบของคุณสมบัติเปลี่ยนไปตามวัตถุต่างๆ สามารถใช้หน้าต่างนี้ในการกำหนดค่าคุณสมบัติต่างๆ ของวัตถุ หรือคอนโทรลต่างๆ ได้อย่างเหมาะสม

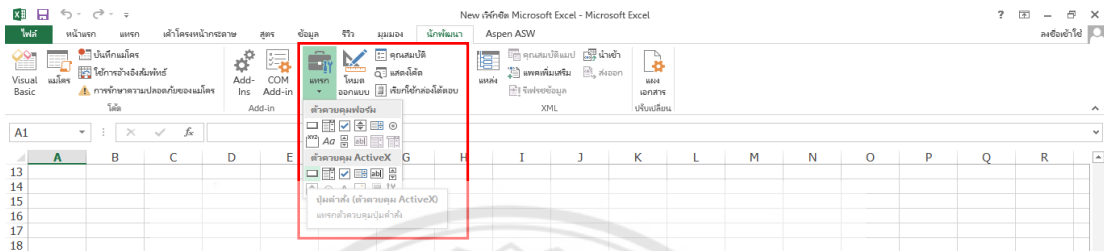


รูปที่ 2.16 หน้าต่าง Properties

2.7.4 Command Button

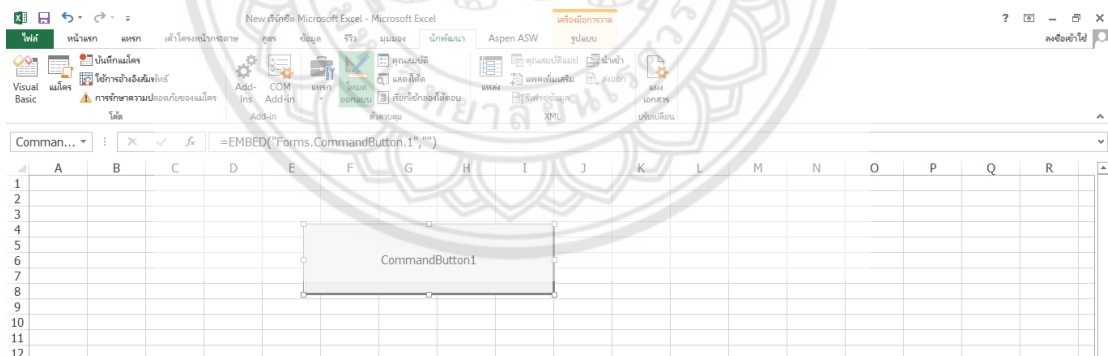
Command Button หรือเรียกสั้นๆ ว่า Button เป็นคอนโทรลที่เราพบได้มากที่สุด เป็นปุ่มที่ให้เกิด Enter หรือคลิกเมาส์เพื่อเลือกตัวเลือกนั้น ซึ่งเราจะใช้ Command Button แทนคำสั่ง 1 คำสั่ง [11]

(1) การเปิดใช้งาน Command Button โดยการคลิกที่นักพัฒนา (Developer) จากนั้นเลือกแทรก เลือกปุ่มคำสั่ง (ตัวควบคุม ActiveX) ดังรูปที่ 2.17



รูปที่ 2.17 หน้าต่างการสร้าง Command Button

(2) เมื่อคลิกปุ่มคำสั่ง (ตัวควบคุม ActiveX) เมาส์จะเปลี่ยนเป็นเครื่องหมายบวก (+) จากนั้นให้ทำการวาด เมื่อวาดเสร็จจะได้กล่อง CommandButton1 แสดงขึ้นมา ดังรูปที่ 2.18

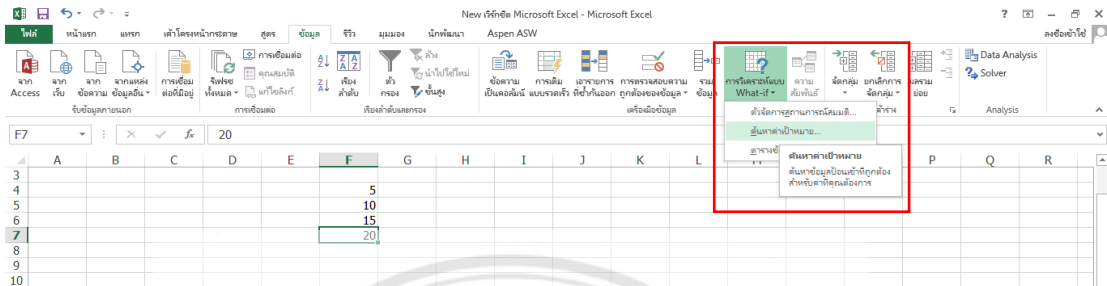


รูปที่ 2.18 การสร้าง Command Button

2.7.5 Goal seek

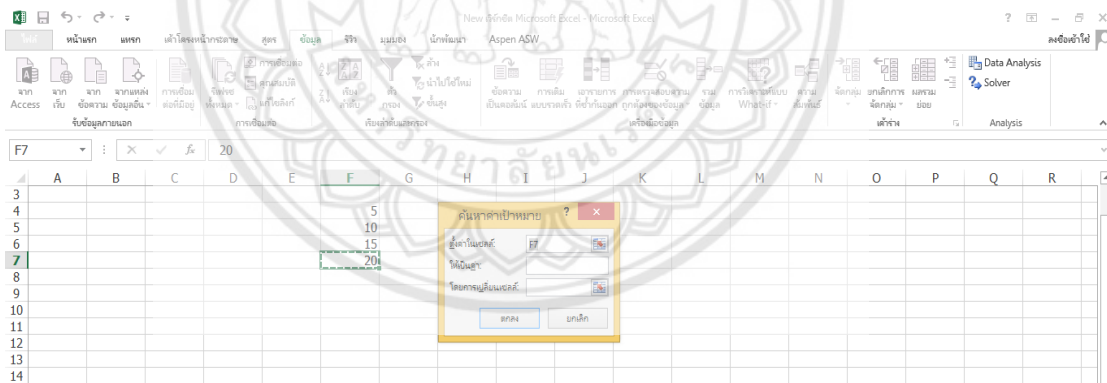
Goal Seek เป็นหนึ่งในความสามารถของ Microsoft Excel 2016 ในการทำให้สามารถบรรลุเป้าหมายที่กำหนด หรือตั้งเกณฑ์ไว้ โดยการปรับค่าบางค่า [12]

(1) คลิก cell ที่กำหนดให้เป็นเป้าหมาย จากนั้นเลือกข้อมูล (Data) เลือกการวิเคราะห์แบบ What-If Analysis จากนั้นเลือกค้นหาค่าเป้าหมาย (Goal Seek) ดังรูปที่ 2.19



รูปที่ 2.19 หน้าต่างทำการวิเคราะห์แบบ What-If Analysis

(2) หน้าต่าง Goal Seek



รูปที่ 2.20 หน้าต่าง Goal Seek

(3) พิมพ์ค่าเป้าหมายลงไป จากนั้นคลิกหรือพิมพ์ตำแหน่ง Cell ที่คุณต้องการที่จะเปลี่ยนค่า คลิก OK

2.8 วิธีการตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม

ขั้นตอนการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging) หลังจากที่ทำการเขียนโปรแกรมเสร็จสิ้นแล้วโปรแกรมนั้นจะต้องได้รับการตรวจสอบก่อนว่ามีข้อผิดพลาด (Error) ในโปรแกรมหรือไม่ซึ่งอาจเกิดจากการเขียนโปรแกรมที่ผิดพลาดหลักไวยากรณ์ของภาษาเป็นต้นโดยทั่วไปจะมีวิธีที่จะตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม 2 ขั้นตอน ดังนี้

2.8.1 ตรวจสอบด้วยตนเองหรือส่งผู้ชำนาญ (Self-Checking)

ถ้าตนเองเป็นผู้ตรวจสอบต้องทำการทดลองเขียนโปรแกรมลงบนกระดาษแล้วไล่ตรวจสอบการทำงานของโปรแกรมทีละขั้นด้วยตนเองว่าโปรแกรมมีการทำงานที่ถูกต้องได้ผลลัพธ์ตรงตามความเป็นจริงหรือไม่ หรือตรวจสอบโดยวิธีระเบียบเชิงตัวเลข แต่ถ้าส่งผู้ชำนาญต้องทำการบอกวัตถุประสงค์ ผลลัพธ์ที่ต้องการ และการทำงานของโปรแกรมอย่างละเอียดเนื่องจากจะได้รับการตรวจสอบที่ถูกต้อง [13]

2.8.2 ตรวจสอบด้วยโปรแกรมโดยใช้ข้อมูลทดสอบ (Test data)

เป็นการทดสอบโปรแกรมเมื่อมีการรันโปรแกรมให้ทำการใส่ข้อมูลที่ถูกต้อง ที่มาจากปัญหาอย่างง่ายที่มีผลเฉลยแน่นอนตรง หรือจากผลการทดลองที่ได้มีผู้ทำมาแล้ว ลงไปในโปรแกรม และดูว่าผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรมถูกต้องตามความเป็นจริงหรือตรงตามที่ต้องการหรือไม่ ถ้าพบว่าไม่ถูกต้องก็ต้องดำเนินการแก้ไขโปรแกรมต่อไป การสมมติข้อมูลตัวแทนเพื่อการทดสอบเป็นสิ่งที่มีความสำคัญเป็นอย่างมาก ลักษณะของข้อมูลตัวแทนที่ดีควรจะสมมติทั้งข้อมูลที่ถูกต้องและข้อมูลที่ผิดพลาด เพื่อทดสอบว่าโปรแกรมที่พัฒนาขึ้นสามารถครอบคลุมการปฏิบัติงานในเงื่อนไขต่างๆ ได้ครบถ้วน [14]

2.9 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในงานวิจัยที่ผ่านมาของการออกแบบกระบวนการ Hydrodealkylation of Toluene to benzene (HDA) ส่วนใหญ่จะทำการจำลองบน Aspen Plus Program หรือโปรแกรมไฮซิส (HYSYS) ซึ่งถ้าต้องการใช้งานโปรแกรมเหล่านี้ได้ ต้องเป็นผู้ที่มีความชำนาญในระดับหนึ่ง เนื่องจากการทำงานหรือตัวโปรแกรมมีความซับซ้อน ดังนั้นในการวิจัยนี้จะศึกษาการออกแบบ และเขียนโปรแกรมในการออกแบบถึงปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องของกระบวนการ HDA โดยการเขียนโปรแกรมโดยใช้ Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel ที่เป็นส่วนหนึ่งใน Microsoft Excel นับว่าเป็นโปรแกรมที่ทุกคนสามารถเข้าถึงได้ง่าย และสะดวกต่อใช้งานมากยิ่งขึ้น

ปี ค.ศ. 2006 Marius Govatsmark และคณะ ทำการวิจัยเรื่อง การนำระบบควบคุมแบบ Plantwide ไปใช้กับกระบวนการ HDA เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพในสถานะดำเนินการที่ไม่ขึ้นกับเวลา

และการควบคุมการเพิ่มประสิทธิภาพ โดยการเลือกควบคุมตัวแปร ซึ่งผลลัพธ์อัตราการป้อนเข้าเป็นอีกหนึ่งวิธีที่สำคัญของการดำเนินงานที่ต้องทำให้เหมาะสมเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพ ซึ่งแบบจำลองที่มีสถานะคงที่ในกรณีนี้สร้างขึ้นใน Aspen Plus™ ซึ่งเพียงพอสำหรับการเลือกตัวแปรที่มีการควบคุมจำเป็นต้องมีแบบไดนามิกในการออกแบบและทดสอบระบบควบคุมที่สมบูรณ์ ซึ่งรวมถึงการควบคุมบังคับ (Regulatory control) [15]

ปี ค.ศ. 2007 Antonio C. B. de Araujo และคณะ จากงานวิจัยนี้ได้อธิบายเกี่ยวกับการออกแบบโครงสร้างควบคุมโรงงานขนาดใหญ่สำหรับกระบวนการ HDA ในการวิเคราะห์และการเพิ่มประสิทธิภาพแบบ "บนลงล่าง" แบบคงที่ ในงานวิจัยนี้ได้กำหนดอัตราการผลิต การออกแบบควบคุมการอัตราการป้อนเข้า และการจำลองแบบไดนามิกแบบไม่เชิงเส้น เพื่อตรวจสอบโครงสร้างการควบคุม เน้นการออกแบบที่เป็นระบบของชั้นควบคุมซึ่งเป็นการควบคุมสำหรับการทำงานที่ดีที่สุดที่ขั้นที่สูงขึ้น สร้างขึ้นใน Aspen Plus™ เพื่อให้โครงสร้างมีประสิทธิภาพในการทำงานที่ดี โดยผลลัพธ์ที่ได้จากการควบคุมตัวแปรต่างๆ พบว่าอุณหภูมิที่เหมาะสมที่ทำให้ได้ร้อยละ Conversion 95 เท่ากับ 963-977 เคลวิน และอัตราการป้อนเข้าของสารแสดงผลการตอบสนองแบบไดนามิกในทางที่ดี [16]

ปี ค.ศ. 2008 Gonzalo Guille'n-Gosalbez และคณะ จากงานวิจัยนี้ได้เสนอกรอบแนวคิดใหม่ในการออกแบบกระบวนการทางเคมี ใช้เทคนิคการสร้างแบบจำลองเชิงจำนวนเต็มเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพโครงสร้างพื้นฐานของกระบวนการผลิตทางเคมี โดยการคำนวณการลดผลกระทบด้านสิ่งแวดล้อมและค่าใช้จ่าย ซึ่งผลกระทบด้านสิ่งแวดล้อมจะวัดผ่าน Eco-indicator 99 นำมาการประยุกต์ใช้กับปัญหาการออกแบบของกระบวนการ HDA ของโทลูอีน นับว่าเป็นข้อได้เปรียบหลักของแนวทางการวิจัยนี้เนื่องจากเป็นกระบวนการที่รู้จักอย่างแพร่หลาย ได้ศึกษาความสมดุลของต้นทุนวัสดุ สมดุลพลังงาน ได้ปริมาณความร้อนที่ออกจากถังปฏิกรณ์เท่ากับ -55.24 กิโลจูลต่อโมล ผลลัพธ์เหล่านี้ได้แสดงให้เห็นว่าการปรับปรุงด้านสิ่งแวดล้อมที่สำคัญสามารถทำได้สามารถทำได้โดยการปรับเปลี่ยนโครงสร้างในกระบวนการ [18]

ปี ค.ศ. 2009 Woranee Paengjuntuek และคณะ ในงานวิจัยนี้ได้มีการเลือกกระบวนการ hydroalkylation (HDA) เสนอการควบคุมการหมุนเวียนของกระบวนการแลกเปลี่ยนกระบวนการผลิตสำหรับการนำความร้อนกลับมาใช้ใหม่ภายในกระบวนการด้วยโปรแกรมไฮซิส (HYSYS) โดยการควบคุม By pass ของตัวแลกเปลี่ยนความร้อนกระบวนการ (1) การควบคุมและหลีกเลี่ยงกระแสร้อน (2) การควบคุมกระแสเย็นและหลีกเลี่ยงกระแสร้อน (3) ควบคุมและหลีกเลี่ยงกระแสเย็น (4) ควบคุมกระแสร้อนและหลีกเลี่ยงกระแสเย็น พบว่าในการควบคุม By pass ของตัวแลกเปลี่ยนความร้อนกระบวนการมีประสิทธิภาพมากกว่าทางเลือกอื่นๆ เนื่องจากให้ผลรวมของค่า Integral of absolute errors (IAE) เพียงเล็กน้อย [19]

ปี ค.ศ. 2010 มหาวิทยาลัยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีฮ่องกง (HKUST) ได้ทำการวิจัยโดยการจัดตั้งโครงการในการสอน Excel ที่ใช้งานง่ายและประยุกต์ (VBA) ในการเขียนโปรแกรมสำหรับวิศวกรรมเคมีเพื่อให้นักเรียนได้รับประโยชน์จากการเขียนโปรแกรมใน Excel VBA เปรียบเทียบกับ

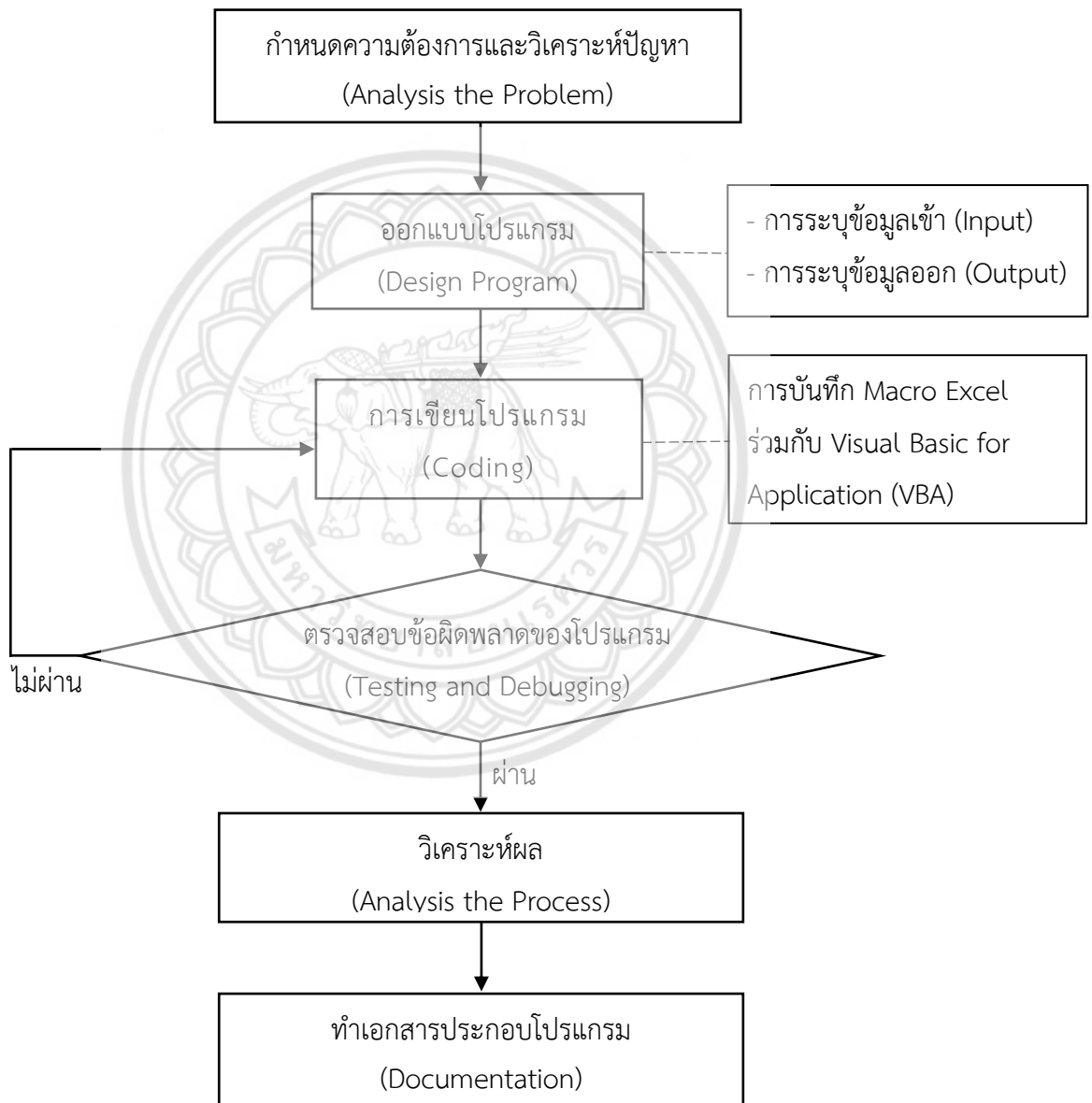
โปรแกรมอื่นๆ ด้านเนื้อหาทั่วไปถูกเน้นในด้านวิศวกรรมเคมี ไม่ว่าจะเป็น การออกแบบเครื่องช่วยในการทำงาน การควบคุมกระบวนการ และการเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ เช่น โปรแกรมการออกแบบในการป้อนสารเข้าเครื่องปฏิกรณ์ชีวภาพแบบเฟดแบทช์ (Fed-batch Bioreactor) หรือโปรแกรมคำนวณแรงดันตกคร่อมการไหลของของไหลในท่อ สามารถทำได้จากฟังก์ชัน Excel ที่มีอยู่แล้วคือ Goal Seek ร่วมกับการเขียนโปรแกรม (โปรแกรม Excel VBA) เป็นต้น ซึ่งจากการวิจัยนี้ Excel VBA นับว่าเป็นโปรแกรมที่ใช้งานง่ายและสามารถการแก้ปัญหาเช่นเดียวกันเมื่อเปรียบเทียบกับโปรแกรมอื่นๆ [20]



บทที่ 3

วิธีการดำเนินงานวิจัย

ในการดำเนินงานวิจัยการหาสถานะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องสำหรับกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลูอีน สามารถแสดงขั้นตอนการดำเนินงานวิจัยในรูปแบบของผังงานแสดงขั้นตอนการดำเนินโครงการได้ ดังรูปที่ 3.1

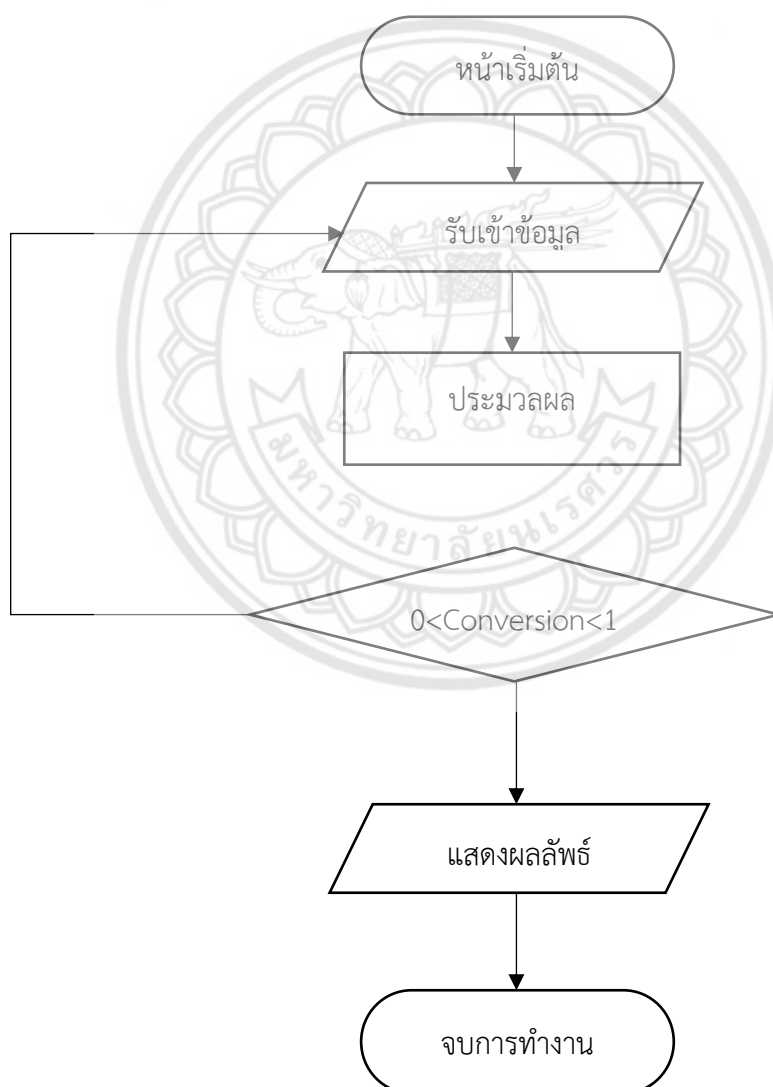


รูปที่ 3.1 ผังงานแสดงขั้นตอนการดำเนินโครงการ

3.1 กำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหา (Analysis the problem)

จากการแก้ไขปัญหางานที่ซับซ้อนรวมไปถึงปัญหาด้านวิศวกรรม ได้รับอิทธิพลอย่างใดในการใช้งานด้านฮาร์ดแวร์และซอฟต์แวร์คอมพิวเตอร์ สิ่งนี้นำไปสู่การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในเชิงพาณิชย์ ตัวอย่าง เช่น โปรแกรมไฮซิส (HYSYS) โปรแกรม Aspen plus ดังนั้นทางคณะผู้จัดจึงได้นำ Microsoft Excel 2016 ซึ่งนับว่าเป็นโปรแกรมที่ใช้งานง่าย และสามารถแก้ปัญหาคำนวณได้จริงเมื่อเปรียบเทียบกับโปรแกรมอื่นๆ อีกทั้งการวิจัยนี้ทางคณะผู้จัดทำได้นำกระบวนการผลิตเบนซินจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีนมาใช้ในการศึกษา และเขียนโปรแกรมออกแบบถึงปฏิกิริยเคมีแบบต่อเนื่องอีกด้วย

3.2 ออกแบบโปรแกรม (Design Program)



รูปที่ 3.2 ผังงานแสดงขั้นตอนการออกแบบโปรแกรม (Design Program)

3.2.1 การระบุข้อมูลเข้า (Input)

- | | |
|--|-------------------|
| (1) อุณหภูมิ | เคลวิน |
| (2) ความดัน | บาร์ |
| (3) อัตราการไหลเชิงโมลขาเข้า | กิโลโมลต่อชั่วโมง |
| (4) ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นในถังปฏิกรณ์เคมี | |
| (5) ค่าคงที่ปฏิกิริยา | |

3.2.2 การระบุข้อมูลออก (Output)

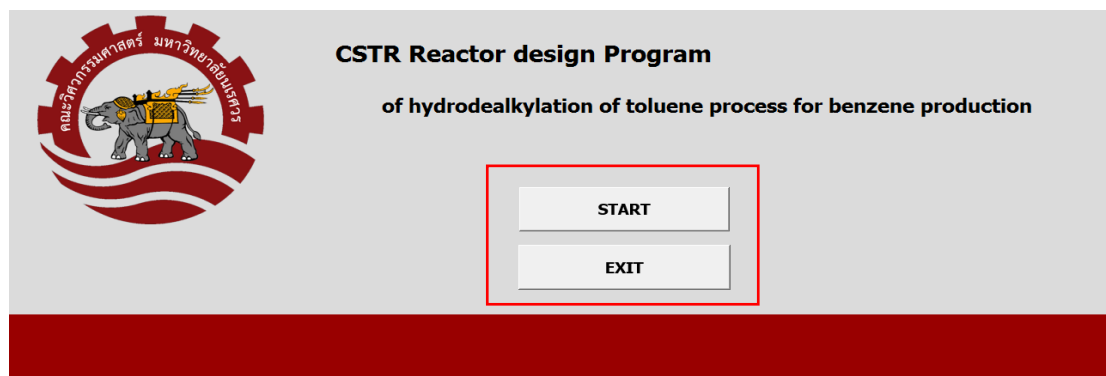
- | | |
|--|-------------------|
| (1) Conversion | |
| (2) อัตราการไหลเชิงโมลขาออก | กิโลโมลต่อชั่วโมง |
| (3) ความเข้มข้นของสาร | กิโลโมลต่อลิตร |
| (4) ปริมาตรของถังปฏิกรณ์เคมี | ลูกบาศก์เมตร |
| (5) การเปลี่ยนแปลงเอนทัลปีของปฏิกิริยา | กิโลจูลต่อโมล |

3.3 การเขียนโปรแกรม (Coding)

ในการเขียน Code นั้นทางคณะผู้จัดทำงานวิจัยจะนำฟังก์ชันต่างๆ มาใช้ในการเขียน Code ลงบน Microsoft Excel 2016 เพื่อนำไปสร้างเป็นโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องสำหรับกระบวนการ HDA โดยใช้การบันทึก Macro Excel ร่วมกับ Visual Basic for Application (VBA) ในการเขียนโปรแกรม

ตัวอย่าง Code คำสั่งที่ใช้เขียนเพื่อให้โปรแกรมทำงานตามความต้องการ มีดังต่อไปนี้

3.3.1 หน้าต่างเริ่มต้นโปรแกรม (Start)



รูปที่ 3.3 หน้าต่างเริ่มต้นโปรแกรม (Start)

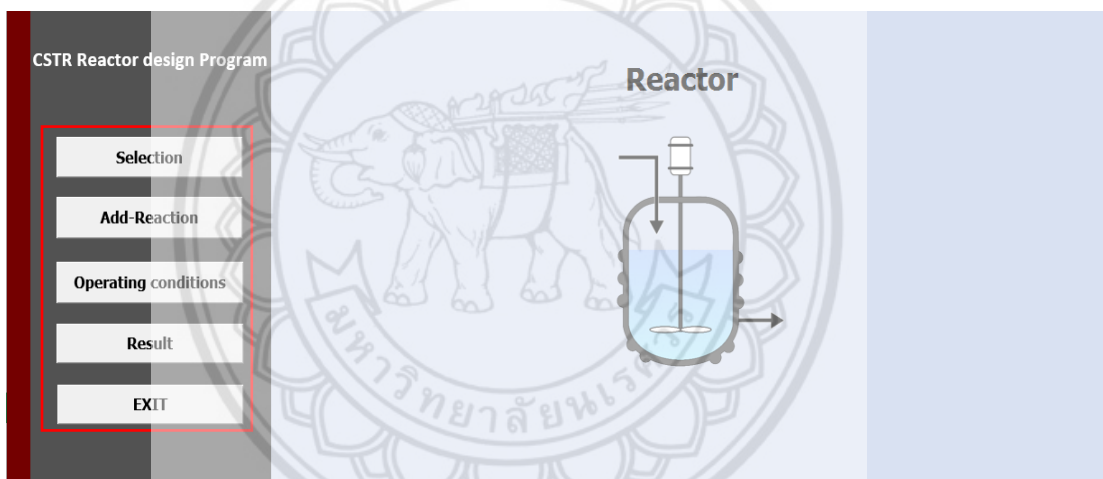
```

Sub Start()
    Sheets("Reactor").Select
End Sub

Sub macroExit()
    Application.DisplayAlerts = False
    Application.Quit
End Sub

```

3.3.2 หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม (Reactor)



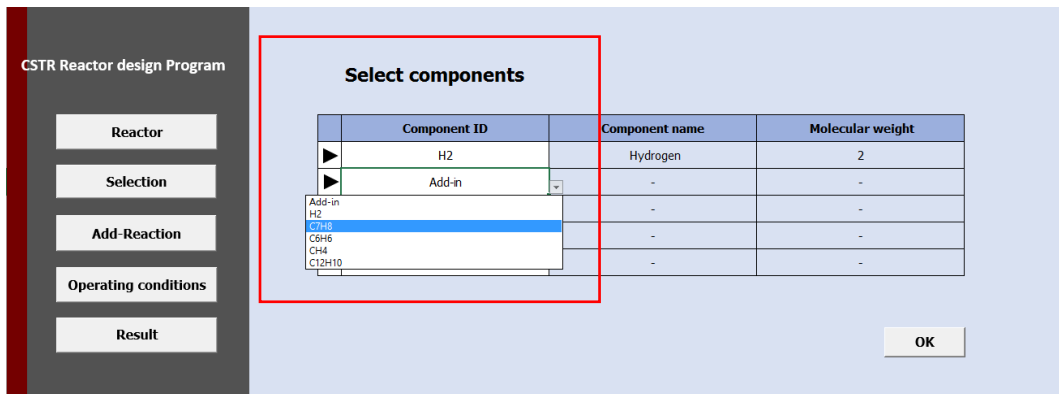
รูปที่ 3.4 หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม (Reactor)

```

Sub Reactor()
    Sheets("Reactor").Select
End Sub

```

3.3.3 หน้าต่างเลือกสารประกอบ (Select Component)



รูปที่ 3.5 หน้าต่างเลือกสารประกอบ (Select Component)

Sub Selection()

Sheets("Selection").Select

Range("F6").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-1],Select,2,0)"

Range("F7").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-1],Select,2,0)"

Range("F8").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-1],Select,2,0)"

Range("F9").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-1],Select,2,0)"

Range("G6").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-2],Select,3,0)"

Range("G7").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-2],Select,3,0)"

Range("G8").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-2],Select,3,0)"

```
Range("G9").Select
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-2],Select,3,0)"
```

```
Range("G10").Select
```

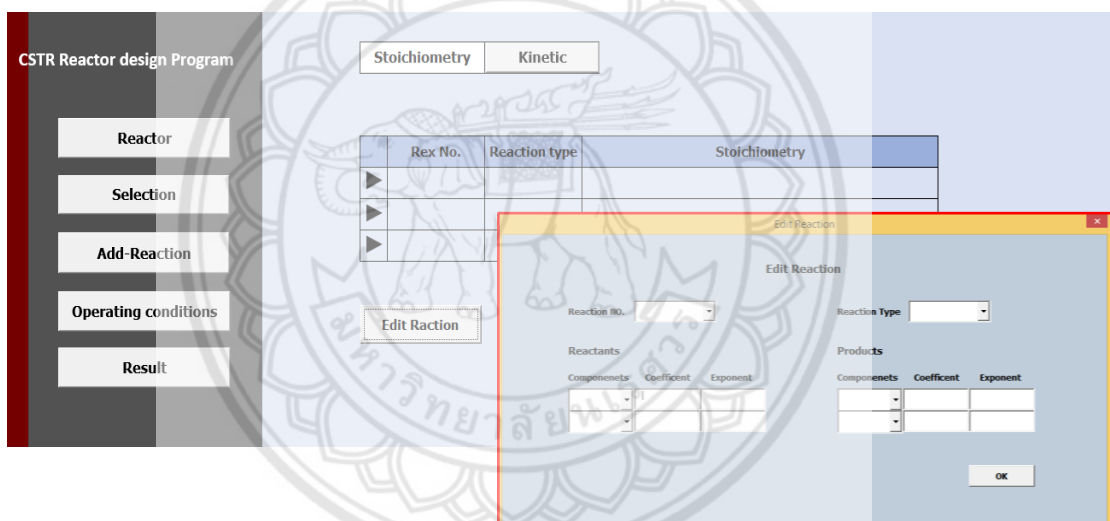
```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "=VLOOKUP(RC[-2],Select,3,0)"
```

```
Range("G11").Select
```

```
End Sub
```

3.3.4 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยา (Add Reaction)

3.3.4.1 Stoichiometry



รูปที่ 3.6 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาแบบ Stoichiometry (Add Reaction)

```
Private Sub CommandButton1_Click()
```

```
    If (ReactionNO = 1) Then
```

```
        Sheets("Edit-reaction").Select
```

```
        Range("F10").Value = Component1.Value
```

```
        Range("F11").Value = Component2.Value
```

```
        Range("G10").Value = TextBox5.Value
```



```
Range("H11").Value = TextBox8.Value  
Range("L10").Value = Component3.Value  
Range("L11").Value = Component4.Value  
Range("M10").Value = TextBox11.Value  
Range("M11").Value = TextBox12.Value  
Range("N10").Value = TextBox13.Value  
Range("N11").Value = TextBox14.Value  
Sheets("Add-reaction").Select  
Range("E7").Value = ReactionNO.Value  
Range("F7").Value = Reactiontype.Value  
Range("G7").Value = Sheets("Data").Range("J14")  
Range("H7").Value = Component1.Value  
Range("I7").Value = Sheets("Data").Range("L14")  
Range("J7").Value = Sheets("Data").Range("M14")  
Range("K7").Value = Component2.Value  
Range("M7").Value = TextBox11.Value  
Range("N7").Value = Component3.Value  
Range("O7").Value = Sheets("Data").Range("R14")  
Range("P7").Value = TextBox12.Value  
Range("Q7").Value = Component4.Value  
If (Reactiontype = Reversible) Then  
Range("L7").Value = Sheets("Data").Range("O14")  
Else  
Range("L7").Value = Sheets("Data").Range("O15")  
End If
```

```
Elseif (ReactionNO = 2) Then
  Sheets("Add-reaction").Select
  Range("E8").Value = ReactionNO.Value
  Range("F8").Value = Reactiontype.Value
  Range("G8").Value = Sheets("Data").Range("J15")
  Range("H8").Value = Component1.Value
  Range("I8").Value = Sheets("Data").Range("L15")
  Range("J8").Value = TextBox6.Value
  Range("K8").Value = Component2.Value
  Range("M8").Value = TextBox11.Value
  Range("N8").Value = Component3.Value
  Range("O8").Value = Sheets("Data").Range("R15")
  Range("P8").Value = TextBox12.Value
  Range("Q8").Value = Component4.Value
  If (Reactiontype = Reversible) Then
    Range("L8").Value = Sheets("Data").Range("O14")
  Else
    Range("L8").Value = Sheets("Data").Range("O15")
  End If
  Sheets("Edit-reaction").Select
  Range("G15").Value = ReactionNO.Value
  Range("M15").Value = Reactiontype.Value
  Range("F19").Value = Component1.Value
  Range("F20").Value = Component2.Value
  Range("G19").Value = TextBox5.Value
```

```
Range("L19").Value = Component3.Value
Range("L20").Value = Component4.Value
Range("M19").Value = TextBox11.Value
Range("M20").Value = TextBox12.Value
Elseif (ReactionNO = 3) Then
Sheets("Add-reaction").Select
Range("E9").Value = ReactionNO.Value
Range("F9").Value = Reactiontype.Value
Range("G9").Value = Sheets("Data").Range("J16")
Range("H9").Value = Component1.Value
Range("I9").Value = Sheets("Data").Range("L16")
Range("J9").Value = Sheets("Data").Range("M16")
Range("K9").Value = Component2.Value
Range("M9").Value = TextBox11.Value
Range("N9").Value = Component3.Value
Range("O9").Value = Sheets("Data").Range("R16")
Range("P9").Value = TextBox12.Value
Range("Q9").Value = Component4.Value
Range("L9").Value = Sheets("Data").Range("O16")
Sheets("Edit-reaction").Select
Range("G24").Value = ReactionNO.Value
Range("M24").Value = Reactiontype.Value
Range("F28").Value = Component1.Value
Range("F29").Value = Component2.Value
Range("G28").Value = TextBox5.Value
```

```

Range("G29").Value = TextBox6.Value

Range("L28").Value = Component3.Value

Range("L29").Value = Component4.Value

Range("M28").Value = TextBox11.Value

Range("M29").Value = TextBox12.Value

End If

Sheets("Add-reaction").Select

Unload Editreaction

End Sub

```

3.3.4.1 Kinetic

CSTR Reactor design Program

Reactor Selection Add-Reaction Operating conditions Result

Stoichiometry Kinetic

1 C7H8 + 1 H2 → 1 C6H6 + 1 CH4 Reaction NO 1

Rate

k

R

E

cal/mol.K cal/mol cal/mol.K cal/mol

2 C6H6 + 0 O2 ↔ 1 C12H10 + 1 H2 Reaction NO 2

Rate

Forward reaction Backward reaction

k

R

E

cal/mol.K cal/mol cal/mol.K cal/mol

Reaction NO

Rate

k

R

E

cal/mol.K cal/mol cal/mol.K cal/mol

OK

รูปที่ 3.7 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาแบบ Kinetic (Add Reaction)

Sub Kinetic()

Sheets("Kinetic").Select

Sheets("Kinetic").Select

Range("E5").Value = Sheets("Data").Range("J14")

Range("F5").Value = Sheets("Data").Range("K14")

Range("G5").Value = Sheets("Data").Range("L14")

Range("H5").Value = Sheets("Data").Range("M14")

Range("I5").Value = Sheets("Data").Range("N14")

Range("J5").Value = Sheets("Data").Range("O14")

Range("K5").Value = Sheets("Data").Range("P14")

Range("L5").Value = Sheets("Data").Range("Q14")

Range("M5").Value = Sheets("Data").Range("R14")

Range("N5").Value = Sheets("Data").Range("S14")

Range("O5").Value = Sheets("Data").Range("T14")

Range("E16").Value = Sheets("Data").Range("J15")

Range("F16").Value = Sheets("Data").Range("K15")

Range("G16").Value = Sheets("Data").Range("L15")

Range("H16").Value = Sheets("Data").Range("M15")

Range("I16").Value = Sheets("Data").Range("N15")

Range("J16").Value = Sheets("Data").Range("O15")

Range("K16").Value = Sheets("Data").Range("P15")

Range("L16").Value = Sheets("Data").Range("Q15")

Range("M16").Value = Sheets("Data").Range("R15")

Range("N16").Value = Sheets("Data").Range("S15")

Range("O16").Value = Sheets("Data").Range("T15")

```

Range("E27").Value = Sheets("Data").Range("J16")

Range("F27").Value = Sheets("Data").Range("K16")

Range("G27").Value = Sheets("Data").Range("L16")

Range("H27").Value = Sheets("Data").Range("M16")

Range("I27").Value = Sheets("Data").Range("N16")

Range("J27").Value = Sheets("Data").Range("O16")

Range("K27").Value = Sheets("Data").Range("P16")

Range("L27").Value = Sheets("Data").Range("Q16")

Range("M27").Value = Sheets("Data").Range("R16")

Range("N27").Value = Sheets("Data").Range("S16")

Range("O27").Value = Sheets("Data").Range("T16")

Range("E20:J20").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = _
    "=IF('Add-reaction'!R[-12]C[1]="Reversible",Data!R[-18]C[3],""""""""""")"

Range("N20:Q20").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = _
    "=IF('Add-reaction'!R[-12]C[-8]="Reversible",Data!R[-17]C[-6],""""""""""")"

Range("E9:J9").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = _
    "=IF('Add-reaction'!R[-2]C[1]="Reversible",Data!R[-7]C[3],""""""""")"

Range("N9:Q9").Select

ActiveCell.FormulaR1C1 = _
    "=IF('Add-reaction'!R[-2]C[-8]="Reversible",Data!R[-6]C[-6],""""""""")"

```

```

Range("R5").Value = Sheets("Add-reaction").Range("E7")

Range("R16").Value = Sheets("Add-reaction").Range("E8")

Range("R27").Value = Sheets("Add-reaction").Range("E9")

End Sub

```

3.3.5 หน้าต่าง Operating conditions

CSTR Reactor design Program

Operating conditions

Reactor
 Pressure bar
 Temperature K

Feed
 Feed 1
 Pressure bar
 Temperature K

Flow rate

Toluene	<input type="text"/>	kmol/h
Hydrogen	<input type="text"/>	kmol/h
Benzene	<input type="text"/>	kmol/h
Methane	<input type="text"/>	kmol/h
Biphenyl	<input type="text"/>	kmol/h

OK

Feed
 Feed 2
 Pressure bar
 Temperature K

Flow rate

Toluene	<input type="text"/>	kmol/h
Hydrogen	<input type="text"/>	kmol/h
Benzene	<input type="text"/>	kmol/h
Methane	<input type="text"/>	kmol/h
Biphenyl	<input type="text"/>	kmol/h

OK

รูปที่ 3.8 หน้าต่างสภาวะการดำเนินงาน (Operating Condition)

```

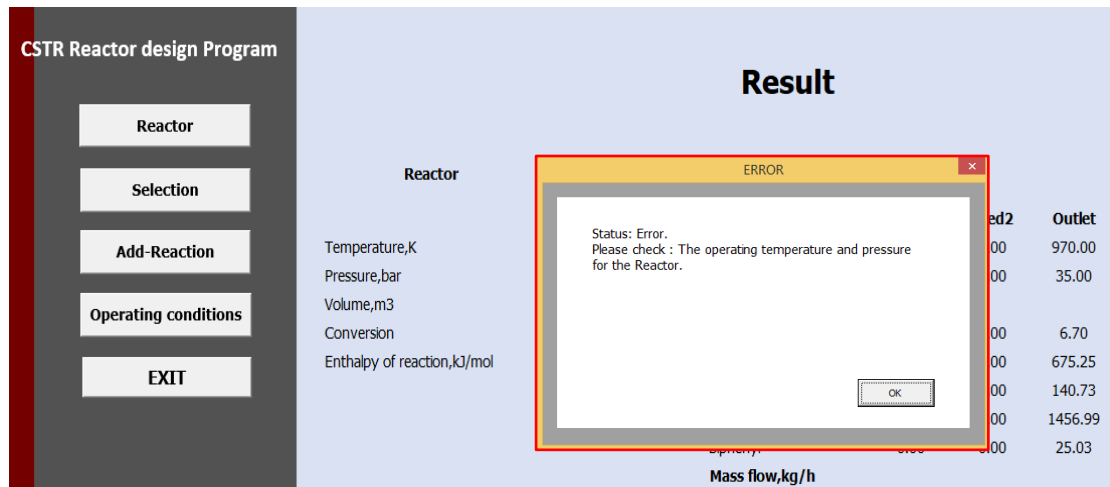
Sub Operate()

    Sheets("Operate").Select

End Sub

```

3.3.6 หน้าต่างแสดงผลลัพธ์เมื่อมีความผิดพลาด (Result Error)



รูปที่ 3.9 หน้าต่างแสดงผลลัพธ์เมื่อมีความผิดพลาด (Result Error)

```
Dim C As Single
```

```
Sheets("Result").Select
```

```
C = Sheets("Result").Cells(11, 8).Value
```

```
If (C < 0) Then
```

```
ERROR.Show
```

```
End If
```

```
Dim T As Single
```

```
Sheets("Result").Select
```

```
T = Sheets("Result").Cells(11, 13).Value
```

```
If (T < 0) Then
```

```
ERROR.Show
```

```
End If
```


3.4 ตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging)

การตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม สามารถตรวจสอบโดยใช้ข้อมูล ทดสอบ เพื่อตรวจสอบดูว่าผลลัพธ์ที่ได้มีถูกต้องตามความเป็นจริง ซึ่งข้อมูลที่น่ามาใช้ได้จากผลการทดลองผ่านโปรแกรม Aspen Plus ของผู้ที่ทำมาแล้ว [21] ดังนี้

3.4.1 สภาวะถึงปฏิกรณ์ถึงปฏิกรณ์เคมีต่อเนื่อง

ความดัน	35	บาร์
อุณหภูมิ	970	เคลวิน

3.4.2 สภาวะและอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้า

ความดัน	34.47	บาร์
อุณหภูมิ	922.44	เคลวิน
โทลูอิน	143.698	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไฮโดรเจน	820.594	กิโลโมลต่อชั่วโมง
เบนซีน	20.422	กิโลโมลต่อชั่วโมง
มีเทน	1319.999	กิโลโมลต่อชั่วโมง

3.4.3 อัตราการไหลเชิงโมลขาออก

ความดัน	34.47	บาร์
อุณหภูมิ	922.44	เคลวิน
โทลูอิน	143.698	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไฮโดรเจน	820.594	กิโลโมลต่อชั่วโมง
เบนซีน	20.422	กิโลโมลต่อชั่วโมง
มีเทน	1319.999	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไบฟีนิล	4.279	กิโลโมลต่อชั่วโมง

3.4.4 Conversion

X = โมลสารเบนซีนของผลิตภัณฑ์/โมลสารโทลูอินของสารตั้งต้นทั้งหมด

$$X = 0.887$$

3.4.5 เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อน (Percentage Error)

$$\text{เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อน} = \frac{|E - S|}{S} \times 100\% \quad (2.49)$$

เมื่อ E คือค่าที่ได้จากการคำนวณ

S คือค่าจริง



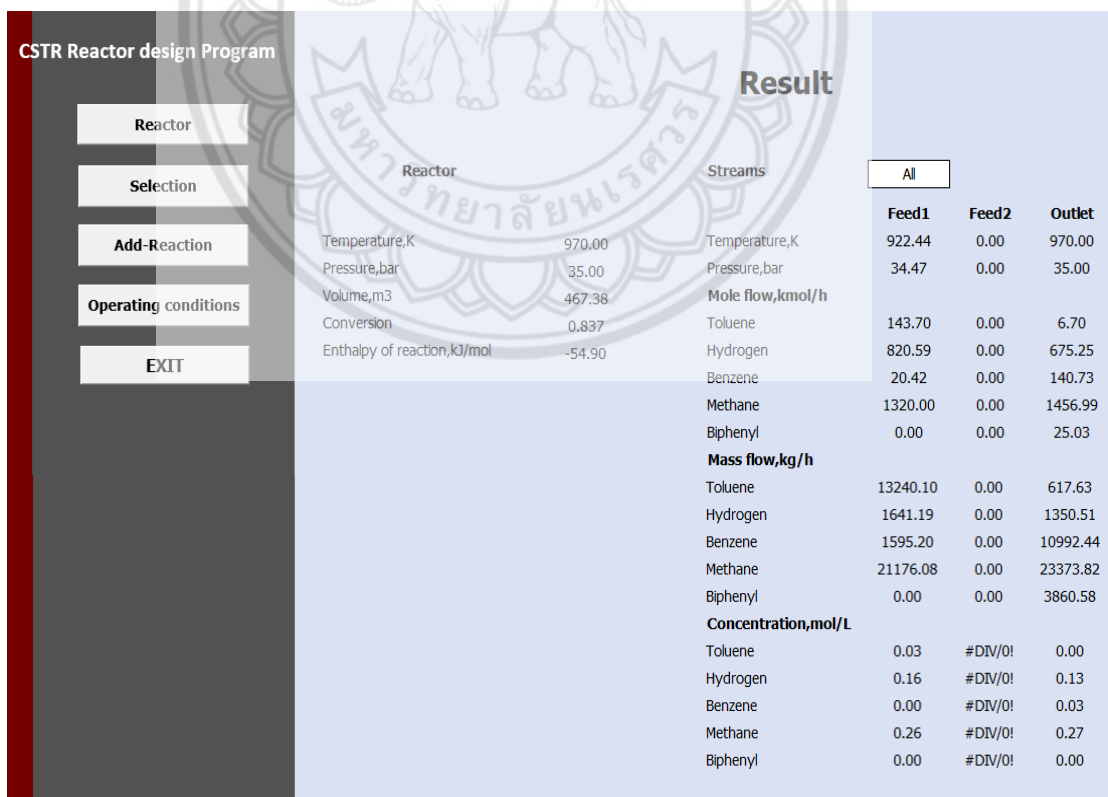
บทที่ 4

ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง

งานวิจัยนี้ได้ทำการสร้างโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง โดยนำกระบวนการผลิตเบนซีนจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีนมาใช้ในการศึกษา โดยได้ทำการวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion และปริมาณของถังปฏิกรณ์จากกราฟ 3 มิติ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง ซึ่งค่าที่เหมาะสมในการออกแบบถังปฏิกรณ์คือต้องสามารถทำให้เกิดผลิตภัณฑ์ที่ต้องการมากที่สุด

4.1 ผลการทดลองจากการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม

จากการป้อนข้อมูล [21] ทำการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging) เพื่อที่จะตรวจสอบดูว่าผลลัพธ์ที่ได้มีถูกต้องตามความเป็นจริง หรือตรงตามที่ต้องการหรือไม่ ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้เป็นไปดังรูปที่ 4.1



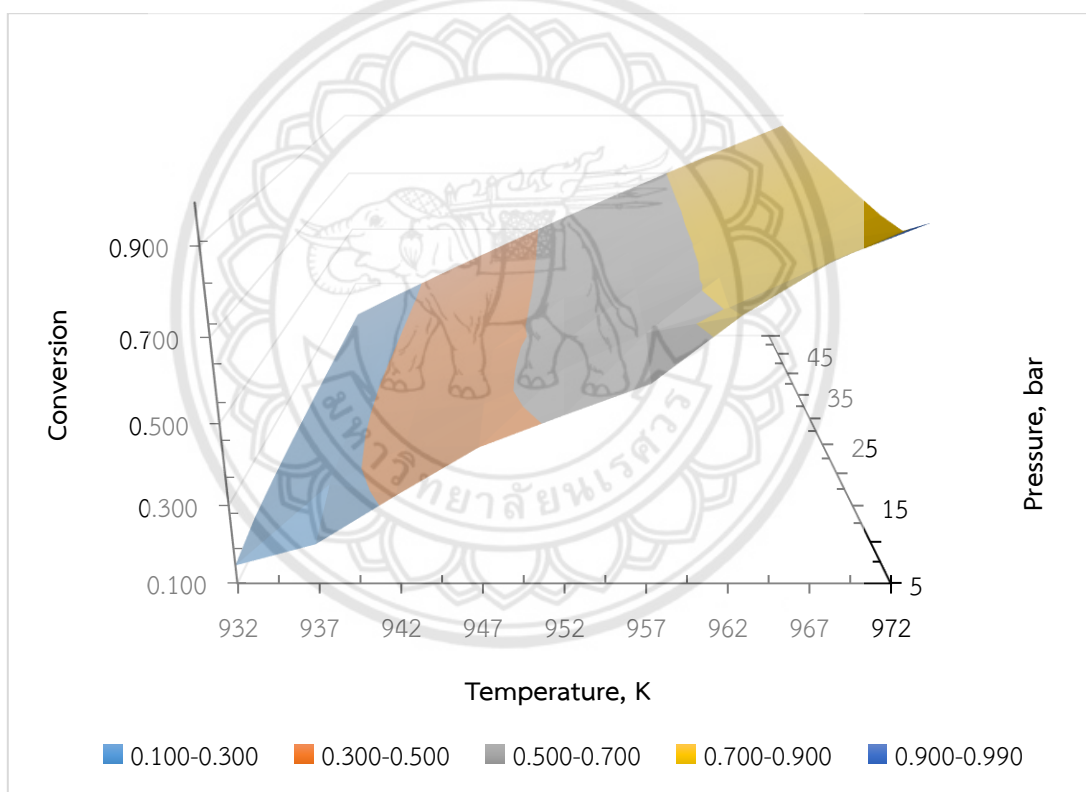
The screenshot shows the 'CSTR Reactor design Program' interface. On the left is a sidebar with buttons: Reactor, Selection, Add-Reaction, Operating conditions, and EXIT. The main window is titled 'Result' and contains a table with the following data:

Reactor		Streams			
		Feed1	Feed2	Outlet	
Temperature,K	970.00	922.44	0.00	970.00	
Pressure,bar	35.00	34.47	0.00	35.00	
Volume,m3	467.38				
Conversion	0.837				
Enthalpy of reaction,kJ/mol	-54.90				
		Mole flow,kmol/h			
		Toluene	143.70	0.00	6.70
		Hydrogen	820.59	0.00	675.25
		Benzene	20.42	0.00	140.73
		Methane	1320.00	0.00	1456.99
		Biphenyl	0.00	0.00	25.03
		Mass flow,kg/h			
		Toluene	13240.10	0.00	617.63
		Hydrogen	1641.19	0.00	1350.51
		Benzene	1595.20	0.00	10992.44
		Methane	21176.08	0.00	23373.82
		Biphenyl	0.00	0.00	3860.58
		Concentration,mol/L			
		Toluene	0.03	#DIV/0!	0.00
		Hydrogen	0.16	#DIV/0!	0.13
		Benzene	0.00	#DIV/0!	0.03
		Methane	0.26	#DIV/0!	0.27
		Biphenyl	0.00	#DIV/0!	0.00

รูปที่ 4.1 ผลลัพธ์ตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม

จากผลลัพธ์จากการรันโปรแกรม ได้แสดงผลดังรูปที่ 4.1 พบว่าปริมาตรถังปฏิกรณ์เท่ากับ 467.38 ลูกบาศก์เมตร ร้อยละ Conversion ของโทลูอินไปเป็นเบนซีนเท่ากับ 83.7 จากผลลัพธ์ Conversion ที่ได้มีความใกล้เคียงตามที่ต้องการ โดยเมื่อเปรียบเทียบกับงานวิจัยที่นำมาอ้างอิงคิดเป็นเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนได้ 5.68 และปริมาณความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์ 54.55 กิโลจูลต่อโมล ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้คล้ายกับงานวิจัยของ Gonzalo Guille'n-Gosa'lbez และคณะ โดยการนำโปรแกรม Aspen Plus™ ทาสภาวะของถังปฏิกรณ์แบบไหลต่อเนื่อง (Plug-flow Reactor) พบว่าที่สภาวะความดัน 3.45 เมกะปาสคาล อุณหภูมิ 895-980 เคลวิน ได้ปริมาณความร้อนออกจากถังปฏิกรณ์ 55.24 กิโลจูลต่อโมล [18]

4.2 การวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion

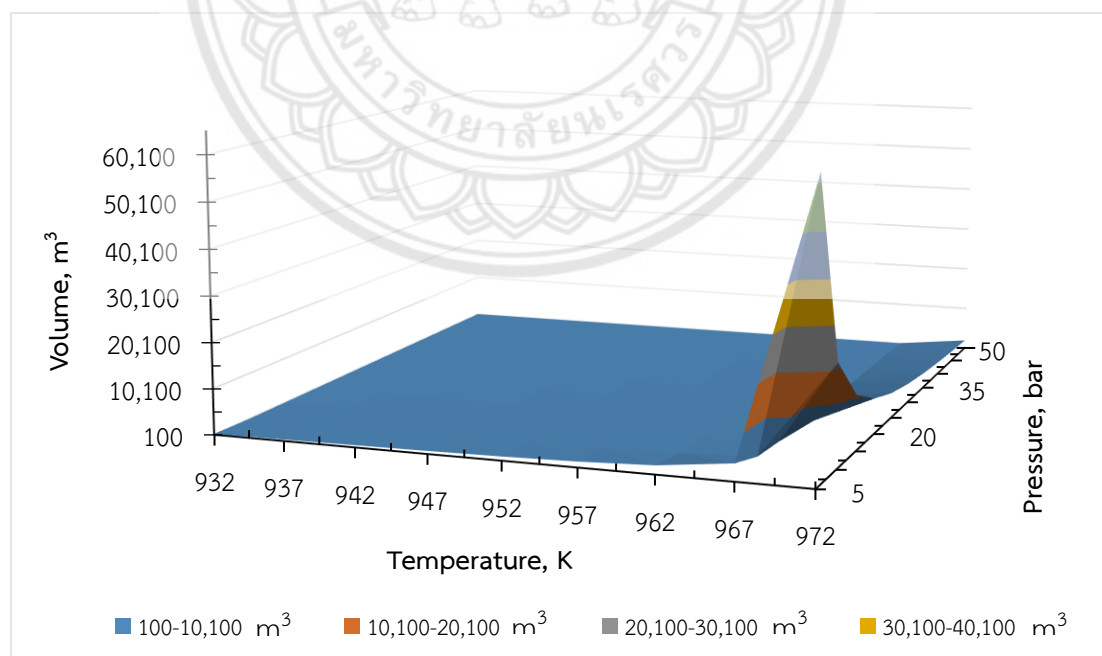


รูปที่ 4.2 ความสัมพันธ์ของปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion

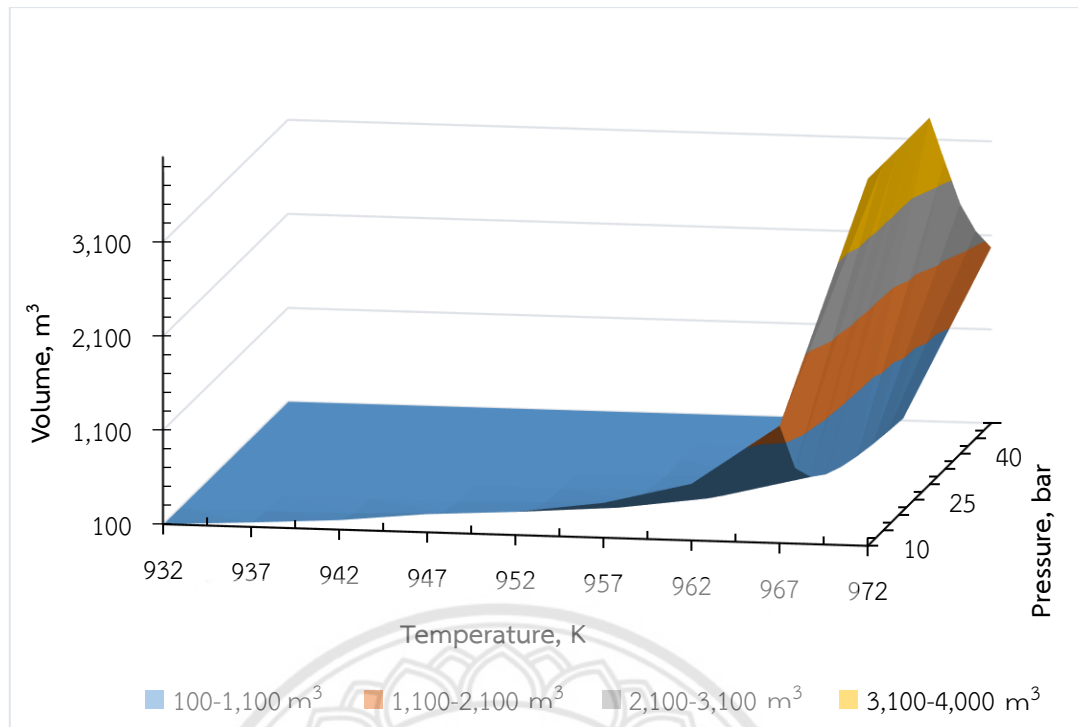
จากรูปที่ 4.2 พบว่าอุณหภูมิที่สามารถทำให้เกิดปฏิกิริยาเท่ากับ 932-972 เคลวิน สภาวะในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่องที่ทำให้ได้ร้อยละ Conversion 94 ซึ่งมีค่าสูงสุด เท่ากับอุณหภูมิ 972 เคลวิน และความดัน 5 บาร์ จากผลลัพธ์ที่ได้คล้ายกับงานวิจัยของ Eduardo S. และคณะ [16] โดยการนำโปรแกรม Aspen Plus™ มาใช้เพื่อการศึกษาและควบคุม ซึ่งอุณหภูมิที่เหมาะสมที่ทำให้ได้ร้อยละ Conversion 95 เท่ากับ 963-977 เคลวิน จากการวิเคราะห์พบว่า เมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น

Conversion จะมีค่าสูงขึ้นเช่นเดียวกัน เนื่องจากอุณหภูมิสูงทำให้โมเลกุลของสารในระบบจะมีพลังงานจลน์สูงขึ้น ทำให้เกิดการชนกันของโมเลกุลมากยิ่งขึ้น ดังนั้นปัจจัยอุณหภูมิจึงเป็นตัวแปรหลักที่มีผลกระทบต่อ Conversion ต่างจากตัวแปรความดันที่เป็นตัวแปรรอง จะเห็นได้ว่าตัวแปรนี้ส่งผลกระทบต่อ Conversion เพียงเล็กน้อย สังเกตได้จากรูป ที่ความดันต่ำ Conversion จะมีการเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย เนื่องจากสถานะของสารตั้งต้นอยู่ในวัฏภาคแก๊ส ทำให้มีแรงยึดเหนี่ยวระหว่างอนุภาคน้อยมาก ส่งผลให้โอกาสการชนกันของอนุภาคเกิดขึ้นได้น้อย แต่ที่ความดันสูง Conversion จะมีค่าคงที่ เนื่องจากความดันที่มากเกินไปส่งผลให้โมเลกุลเกิดการแตกย่อยเป็นโมเลกุลสั้นๆ [22] และจากปฏิกิริยาที่หลักเกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน ส่งผลทำให้ปฏิกิริยาเข้าสู่ภาวะสมดุลได้เร็วมากขึ้นอีกด้วย ซึ่งถ้าในอุตสาหกรรม ที่ต้องคำนึงถึงการลงทุน ปริมาณของผลิตภัณฑ์ และเวลาที่ใช้เป็นสำคัญ จะใช้หลักเลอ ชาเตอลิเอ [21] โดยทำการลดอุณหภูมิเพื่อรบกวนภาวะสมดุล และเพิ่มปัจจัยอื่นที่ส่งผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีอื่น [4] ดังนั้นสภาวะที่เหมาะสมในถึงปฏิกิริยาเคมีแบบต่อเนื่อง จะได้อุณหภูมิ 972 เคลวิน และความดัน 34 บาร์ ใด้ร้อยละของ Conversion 86 อย่างไรก็ตามจากงานวิจัยนี้ได้ตั้งอยู่บนสมมติฐานที่ว่าเป็นกระบวนการผสมที่สมบูรณ์แบบ (Perfect mixing)

4.3 การวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาณถึงปฏิกิริยา



รูปที่ 4.3 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาณถึงปฏิกิริยา ที่ขนาดถังปฏิกิริยา 100-65,000 ลูกบาศก์เมตร



รูปที่ 4.4 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาณถังปฏิกรณ์ ที่ขนาดถังปฏิกรณ์ 100-4,000 ลูกบาศก์เมตร

จากรูปที่ 4.3 พบว่าที่สภาวะอุณหภูมิ 972 เคลวิน และความดัน 5 บาร์ ได้ปริมาตรสูงสุดเท่ากับ 62,375 ลูกบาศก์เมตร และจากรูปที่ 4.4 จากสภาวะอุณหภูมิ 972 เคลวิน และความดัน 34 บาร์ ได้ปริมาตรที่เหมาะสมเท่ากับ 3,517 ลูกบาศก์เมตร จากการวิเคราะห์พบว่า อุณหภูมิเป็นตัวแปรหลักที่มีผลกระทบต่อปริมาตร โดยเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้น ปริมาตรจะเพิ่มขึ้นเช่นเดียวกัน และความดันเป็นตัวแปรรองที่มีผลกระทบต่อปริมาตร สังเกตจากรูปโดยจะแบ่งเป็น 2 ช่วง ช่วงที่ 1 ความดัน ที่อุณหภูมิต่ำ ปริมาตรที่ได้มีการเปลี่ยนแปลงเล็กน้อย ซึ่งต่างจากช่วงที่ 2 ความดัน ที่อุณหภูมิต่ำ ปริมาตรที่ได้มีการเปลี่ยนแปลงอย่างเห็นได้ชัด ตัวอย่างเช่น ที่อุณหภูมิ 972 เคลวิน ความดัน 15 และ 40 บาร์ ได้ปริมาตรเท่ากับ 12,004 และ 2,756 ลูกบาศก์เมตรตามลำดับ ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้เป็นไปตามทฤษฎีแก๊สอุดมคติตามกฎของชาร์ล [9]

บทที่ 5

บทสรุปและข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้ได้ทำการสร้างโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องโดยใช้ Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel โดยได้ทำการวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิ ความดันที่มีผลต่อ conversion และปริมาตรของถังปฏิกรณ์ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง ซึ่งสามารถสรุปผลและข้อเสนอแนะได้ดังนี้

5.1 สรุปผลการดำเนินงาน

5.1.1 การศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมด้วย Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel บน Microsoft Excel 2016

จากการศึกษาพบว่าการใช้ Macro Excel ร่วมกับโปรแกรม VBA Excel สามารถนำไปประยุกต์ใช้ได้จริงในการแก้ปัญหาทางที่ซับซ้อนรวมถึงการแก้ไขปัญหาด้านวิศวกรรม นอกจากนี้ยังสามารถลดขั้นตอนของการทำงาน ช่วยทำให้ประหยัดเวลา เพิ่มประสิทธิภาพในการทำงานและง่ายต่อการใช้งานอีกด้วย

5.1.2 การศึกษาและเรียนรู้การเขียนโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

จากผลลัพธ์ในการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging) พบว่าในการสร้างโปรแกรมสามารถนำไปประยุกต์ในงานได้จริง ทั้งนี้ต้องอยู่ภายใต้สมมติฐานที่ได้กำหนดไว้

5.1.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการ HDA ผ่านโปรแกรมออกแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

5.1.3.1 การวิเคราะห์ปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion และปริมาตรของถังปฏิกรณ์

จากการศึกษาและวิเคราะห์กระบวนการผลิตเบนซินจากปฏิกิริยา Hydrodealkylation ของโทลูอีน พบว่าอุณหภูมิที่สามารถทำให้เกิดปฏิกิริยาเท่ากับ 932-972 เคลวิน และปัจจัยอุณหภูมิคือตัวแปรหลัก ปัจจัยความดันคือตัวแปรรอง โดยสภาวะที่เหมาะสมในถัง

ปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง เท่ากับที่อุณหภูมิ 972 เคลวิน และความดัน 34 บาร์ ได้ร้อยละของ Conversion 86 ปริมาตรที่เหมาะสมเท่ากับ 3,517 ลูกบาศก์เมตร

5.2 ข้อเสนอแนะ

สำหรับการใช้งานโปรแกรมครั้งแรกควรทำตามคู่มือการแนะนำการใช้งานโปรแกรมเพื่อศึกษา และเรียนรู้การทำงานของโปรแกรม ในการทำงานวิจัยนี้ พบว่าการออกแบบโปรแกรมถือเป็นขั้นตอนที่สำคัญมากเนื่องจากต้องออกแบบให้โปรแกรมนั้นใช้งานได้ง่าย ไม่ซับซ้อน และรวมไปถึงหน้าต่างการใช้งานของโปรแกรมต้องมีลักษณะที่สวยงาม น่าใช้อีกด้วย ทั้งนี้ผลลัพธ์ที่นำเสนอในงานวิจัยนี้ ไม่ว่าจะเป็นการศึกษาหาสภาวะที่เหมาะสมของกระบวนการ Hydrodealkylation ของโทลู และตัวอย่างการเขียนโปรแกรม (Coding) อาจถือเป็นพื้นฐานสำหรับผู้ที่สนใจที่จะนำไปพัฒนาต่อ หรือนำเทคโนโลยีนี้ไปประยุกต์ใช้ในระดับโรงงานอุตสาหกรรมได้



เอกสารอ้างอิง

- [1] ทวีศักดิ์ พงษ์อมรพันธ์. (2552). **โครงสร้างตลาดและพฤติกรรมการแข่งขันตลาดสารตัวทำละลายโทลูอีน**. คณะเศรษฐศาสตร์. เศรษฐศาสตร์มหาบัณฑิต (เศรษฐศาสตร์ธุรกิจ). มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์
- [2] Paditporn Saengmahachai. (2008). **Performance Evaluation of Heat Integrated and Control Structures Of Hydrodealkylation (HDA) Plant**. Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Chulalongkorn University, Payathai, Bangkok
- [3] George W. Roberts. (2552). **Chemical Reactions and Chemical Reactors**. สืบค้นเมื่อ 8 ธันวาคม 2560 จาก <http://www.chegg.com/homework-help/questions-and-answers/hydrodealkylation-reaction-used-convert-toluene-c7h8-benzene-c6h6-historically-valuable-to-q18546502>
- [4] Krusarawut. (2559). **ปัจจัยที่มีผลต่อการเกิดปฏิกิริยา**. สืบค้นเมื่อ 9 ธันวาคม 2560 จาก <http://www.krusarawut.net/wp/?p=17533>
- [5] นางสาวกนกกาญจน์ ประทักษ์กุลวงศาและคณะผู้จัดทำ. (2554). **จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ (Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design)**. ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์. มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
- [6] Froment, et al. (1990). **Chemical Reactor Analysis and Design**. 2nd Ed. New York: John Wiley & Sons.
- [7] ผศ. โปรตปราน สิริธีรศาสตร์และคณะผู้จัดทำ. (2542). **การออกแบบปฏิกรณ์เคมี Reaction Engineering**. มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์
- [8] Dr. Suttipong Songprawat. (2016). **Instructional Materials 312303 Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design**. Faculty of Engineering, Naresuan University
- [9] Songkhla Rajabhat University. **แก๊สในอุดมคติ**. สืบค้นเมื่อ 9 พฤษภาคม 2561 จาก <http://oservice.skru.ac.th/ebookft/320/chapter1.pdf>
- [10] **แมโครคืออะไร**. สืบค้นเมื่อ 10 ธันวาคม 2560 จาก <https://www.9experttraining.com>
- [11] อำนาจ นุตะมาน. (2550). **เขียนโปรแกรมและพัฒนาแอปพลิเคชันด้วย VBA บน Excel ฉบับโปรแกรมเมอร์**. (พิมพ์ครั้งที่1). บริษัท วี.พรินทร์

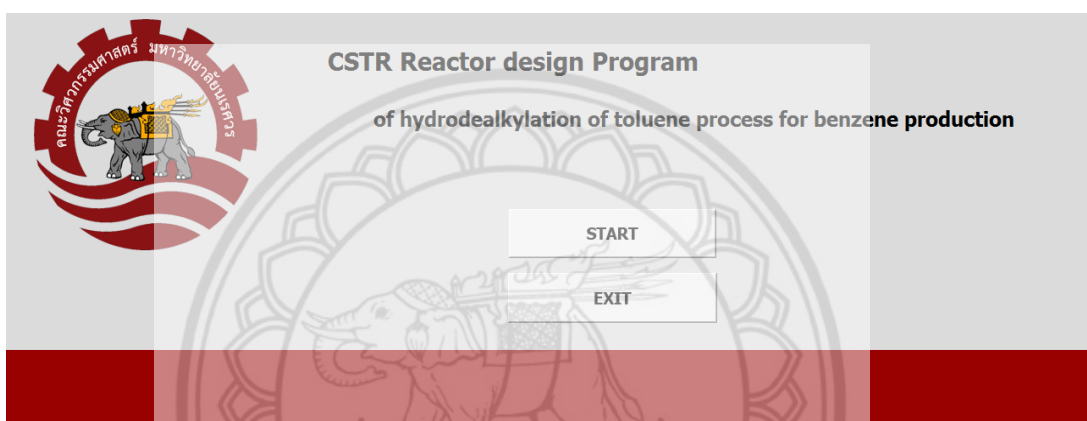
- [12] การวิเคราะห์ข้อมูลด้วย GOAL SEEK ใน Excel สืบค้นเมื่อ 18 มีนาคม 2561 จาก http://socialintegrated.com/excel_optimize_a_result_with_goal_seek
- [13] ketsiri thipnet. (2558). แนวคิดและหลักการเขียนโปรแกรม. สืบค้นเมื่อ 10 ธันวาคม 2561 จาก <http://ketsirithipnet.blogspot.com/2015/>
- [14] ครูอุไรวรรณ โสภาก.บทเรียน วิชาเทคโนโลยีสารสนเทศ 2. สืบค้นเมื่อ 10 ธันวาคม 2560 จาก <https://dekinter2010.wordpress.com/บทเรียน-2/หน่วยที่-3/ขั้นตอนการเขียนโปรแกรม-2/ขั้นตอนการทดสอบความถูก/>
- [15] Marius Govatsmark, et al. (2006). **Application of plantwide control to the HDA process. I—steady-state optimization and self-optimizing control.** Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology, N-7491 Trondheim, Norway
- [16] Eduardo S, et al. (2007). **Application of Plantwide Control to the HAD Process. II - Regulatory Control.** Department of Chemical Engineering, Norwegian University of Science and Technology (NTNU), Trondheim, Norway
- [17] Richard Turton, et al. (2012). **Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes. (Fourth Edition).** John Fuller
- [18] Gonzalo Guillé n-Gosa lbez, et al. (2008). **Application of Life Cycle Assessment to the Structural Optimization of Process Flowsheets.** Department of Chemical Engineering, Carnegie Mellon University, 5000 Forbes Avenue, Pittsburgh, Pennsylvania 15213
- [19] Woranee Paengjuntuek, et al. (2009). **Heat Recovery from Process to Process Exchanger by Using Bypass Control.** Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Thammasat University, Khlong Luang, Pathumthani, Thailand
- [20] Kelvin W.W. Wong, et al. (2010). **Solving tool for chemical engineering core courses.** Chemical & Biomolecular Engineering, HKUST, Hong Kong
- [21] ฉัตรชัย กัญยาจุฑ. (2545). การออกแบบโรงงานทางวิศวกรรม: การสังเคราะห์และการวิเคราะห์กระบวนการผลิต. คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีราชมงคล. วารสารวิศวกรรมราชมงคล
- [22] หลักละอองชาเตอลิเอ. 7 กันยายน 2556. สืบค้นเมื่อ 21 พฤษภาคม 2561 จาก <https://lovechemistry5.wordpress.com/2013/09/07/5-หลักละอองชาเตอลิเอ/>



ก. คู่มือแนะนำการใช้งานโปรแกรม

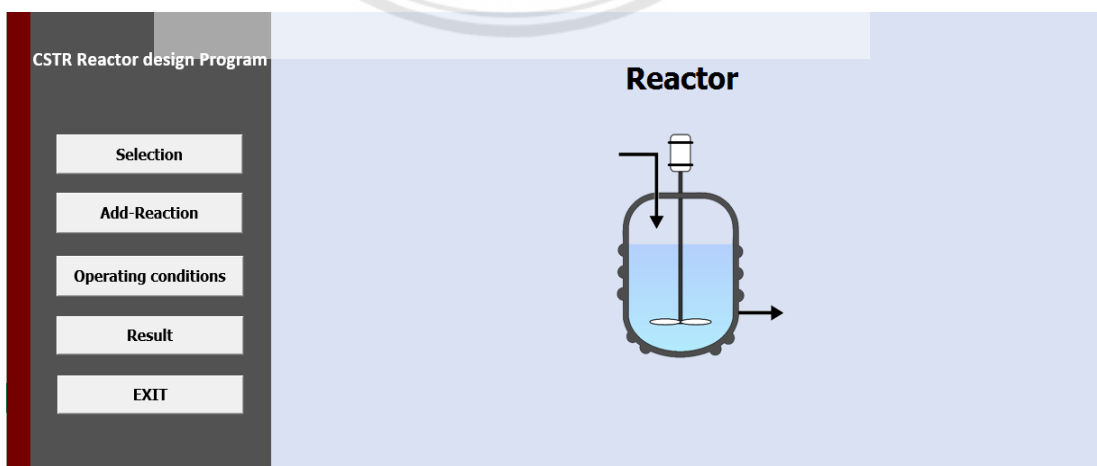
การสร้างคู่มือการใช้งานโปรแกรมการหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง สำหรับกระบวนการ HDA โดย Macro Program ใน Microsoft Excel 2016 จัดทำขึ้นเพื่อให้ผู้ใช้งานโปรแกรมใช้งานได้ง่ายและสะดวกมากยิ่งขึ้น

ในส่วนเริ่มต้นโปรแกรม เป็นส่วนที่เมื่อผู้ใช้งานเปิดโปรแกรมขึ้นมาจะแสดงหน้าต่างเริ่มต้นการใช้งาน ดังรูปที่ ก.1



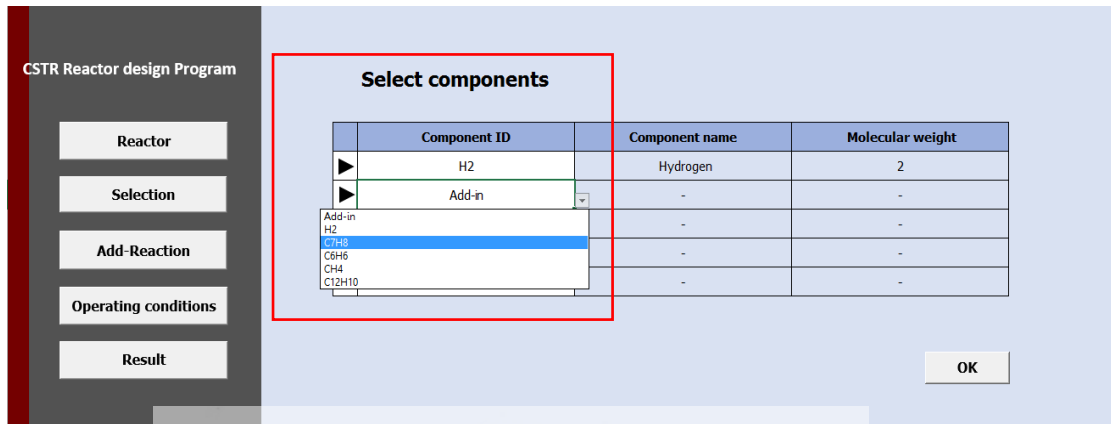
รูปที่ ก.1 หน้าแรกของโปรแกรมการหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์เคมีแบบต่อเนื่อง

เมื่อเลือกคลิกที่ปุ่ม START จะเข้าไปสู่หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม ดังรูปที่ ก.2



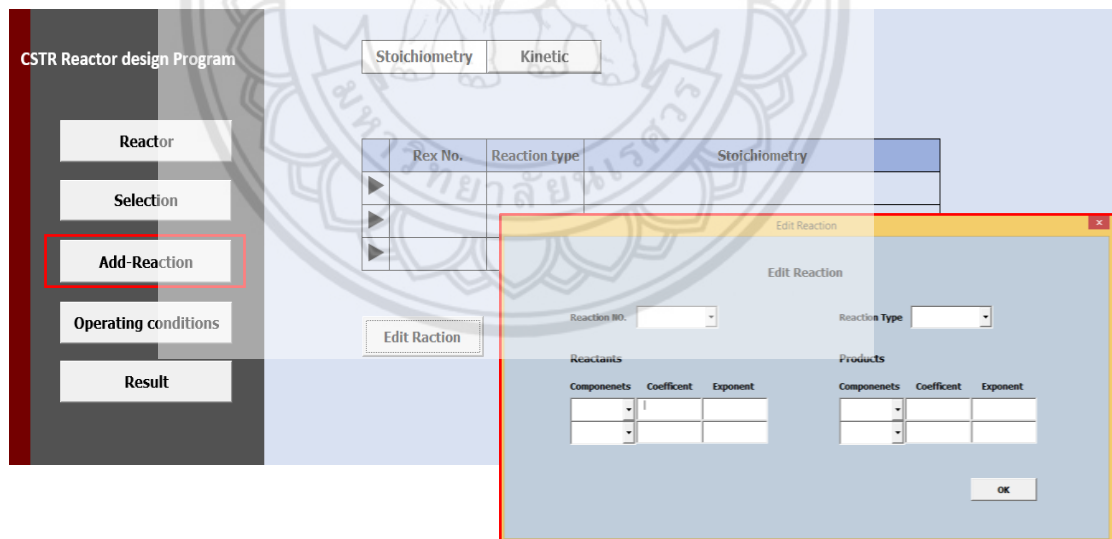
รูปที่ ก.2 หน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม

หลังจากนั้นคลิกที่ Selection เพื่อทำการเลือกสารประกอบ ดังแสดงในรูปที่ ก.3 เมื่อทำการเลือกสารประกอบ



รูปที่ ก.3 หน้าต่างเลือกสารประกอบ

คลิก Add-Reaction เพื่อทำการเพิ่มปฏิกิริยา จากนั้นคลิกที่ Edit Reaction ดังแสดงในรูปที่ ก.4 โดยเป็นการป้อนค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยา



รูปที่ ก.4 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาโดยการป้อนค่าสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยา

จากนั้นคลิกที่ Kinetic เพื่อทำการป้อนข้อมูล Kinetic parameters ดังแสดงในรูปที่ ก.5

CSTR Reactor design Program

Reactor
Selection
Add-Reaction
Operating conditions
Result

Stoichiometry **Kinetic**

1 C7H8 + 1 H2 → 1 C6H6 + 1 CH4 Reaction NO 1

Rate

k cal/mol.K
R cal/mol
E

k cal/mol.K
R cal/mol
E

2 C6H6 + 0 0 ↔ 1 C12H10 + 1 H2 Reaction NO 2

Rate

Forward reaction

k cal/mol.K
R cal/mol
E

Backward reaction

k cal/mol.K
R cal/mol
E

Reaction NO

Rate

k cal/mol.K
R cal/mol
E

k cal/mol.K
R cal/mol
E

OK

รูปที่ ก.5 หน้าต่างการเพิ่มปฏิกิริยาโดยการป้อนข้อมูล Kinetic parameters

คลิกที่ Operating Condition เพื่อป้อนข้อมูลสภาวะการดำเนินงานต่างๆ เช่น อุณหภูมิและความดันของ Reactor อุณหภูมิและความดันของสายขาเข้า อัตราการไหลโดยโมลของสารขาเข้าถึงปฏิกรณ์ เป็นต้น ดังแสดงในรูปที่ ก.6

CSTR Reactor design Program

Operating conditions

Reactor
 Pressure bar
 Temperature K

Feed 1
 Pressure bar
 Temperature K

Flow rate

Toluene	<input type="text"/>	kmol/h
Hydrogen	<input type="text"/>	kmol/h
Benzene	<input type="text"/>	kmol/h
Methane	<input type="text"/>	kmol/h
Biphenyl	<input type="text"/>	kmol/h

OK

Feed 2
 Pressure bar
 Temperature K

Flow rate

Toluene	<input type="text"/>	kmol/h
Hydrogen	<input type="text"/>	kmol/h
Benzene	<input type="text"/>	kmol/h
Methane	<input type="text"/>	kmol/h
Biphenyl	<input type="text"/>	kmol/h

OK

รูปที่ ก.6 หน้าต่างสภาวะการดำเนินงาน

หลังจากทำการป้อนข้อมูลต่างๆ ครบแล้วคลิก Result เพื่อดูผลลัพธ์ที่ได้ ดังแสดงในรูปที่

ก.7

CSTR Reactor design Program

Result

Reactor		Streams			
		All			
		Feed1	Feed2	Outlet	
Temperature,K	970.00	922.44	0.00	970.00	
Pressure,bar	35.00	34.47	0.00	35.00	
Volume,m3	467.38				
Conversion	0.837				
Enthalpy of reaction,kJ/mol	-54.90				
		Mole flow,kmol/h			
		Toluene	143.70	0.00	6.70
		Hydrogen	820.59	0.00	675.25
		Benzene	20.42	0.00	140.73
		Methane	1320.00	0.00	1456.99
		Biphenyl	0.00	0.00	25.03
		Mass flow,kg/h			
		Toluene	13240.10	0.00	617.63
		Hydrogen	1641.19	0.00	1350.51
		Benzene	1595.20	0.00	10992.44
		Methane	21176.08	0.00	23373.82
		Biphenyl	0.00	0.00	3860.58
		Concentration,mol/L			
		Toluene	0.03	#DIV/0!	0.00
		Hydrogen	0.16	#DIV/0!	0.13
		Benzene	0.00	#DIV/0!	0.03
		Methane	0.26	#DIV/0!	0.27
		Biphenyl	0.00	#DIV/0!	0.00

รูปที่ ก.7 หน้าต่างผลลัพธ์

หากหน้าต่างผลลัพธ์แสดงดังรูปที่ ก.8 ให้กลับไปแก้ไขที่หน้า Operating condition เพื่อตรวจสอบความถูกต้องของข้อมูลที่ป้อนอีกครั้ง

CSTR Reactor design Program

Reactor
Selection
Add-Reaction
Operating conditions
EXIT

Result

Reactor

Temperature,K
Pressure,bar
Volume,m3
Conversion
Enthalpy of reaction,kJ/mol

Streams

ERROR

Status: Error.
Please check : The operating temperature and pressure for the Reactor.

OK

Stream	Outlet
00	970.00
00	35.00
00	6.70
00	675.25
00	140.73
00	1456.99
00	25.03

Mass flow,kg/h

รูปที่ ก.8 หน้าต่างแสดงผลเมื่อมีความผิดพลาด





ภาคผนวก ข

ข้อมูลที่ใช้ในการเขียนโปรแกรม

ตารางที่ ข.1 ความจุความร้อนจำเพาะของโพลีเอทิลีนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
50	39040	39.04
64.5	39163.3	39.1633
79	39750	39.75
93.5	41221.1	41.2211
108	43774.7	43.7747
122.5	47315.6	47.3156
137	51569.7	51.5697
151.5	56225.6	56.2256
166	61025.8	61.0258
180.5	65802.1	65.8021
195	70473.2	70.4732
209.5	75023.1	75.0231
224	79476.8	79.4768
238.5	83878.4	83.8784
253	88275.6	88.2756
267.5	92710	92.71
282	97212.6	97.2126
296.5	101801.9	101.8019
311	106485	106.485
325.5	111259.3	111.2593
340	116114.6	116.1146
354.5	121035.5	121.0355
369	126003.3	126.0033
383.5	130997.7	130.9977
398	135998	135.998
412.5	140984.3	140.9843
427	145937.9	145.9379
441.5	150841.6	150.8416
456	155680.5	155.6805
470.5	160441.3	160.4413
485	165113.1	165.1131
499.5	169686.7	169.6867
514	174154.8	174.1548

ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
528.5	178511.5	178.5115
543	182752.8	182.7528
557.5	186875.5	186.8755
572	190878.1	190.8781
586.5	194759.5	194.7595
601	198519.9	198.5199
615.5	202159.9	202.1599
630	205681	205.681
644.5	209084.8	209.0848
659	212373.7	212.3737
673.5	215550.1	215.5501
688	218616.7	218.6167
702.5	221576.6	221.5766
717	224432.7	224.4327
731.5	227188.3	227.1883
746	229846.6	229.8466
760.5	232410.8	232.4108
775	234884.1	234.8841
789.5	237269.7	237.2697
804	239570.8	239.5708
818.5	241790.6	241.7906
833	243932	243.932
847.5	245998	245.998
862	247991.6	247.9916
876.5	249915.5	249.9155
891	251772.4	251.7724
905.5	253565	253.565
920	255295.8	255.2958
934.5	256967.2	256.9672
949	258581.6	258.5816
963.5	260141.3	260.1413
978	261648.4	261.6484
992.5	263105	263.105

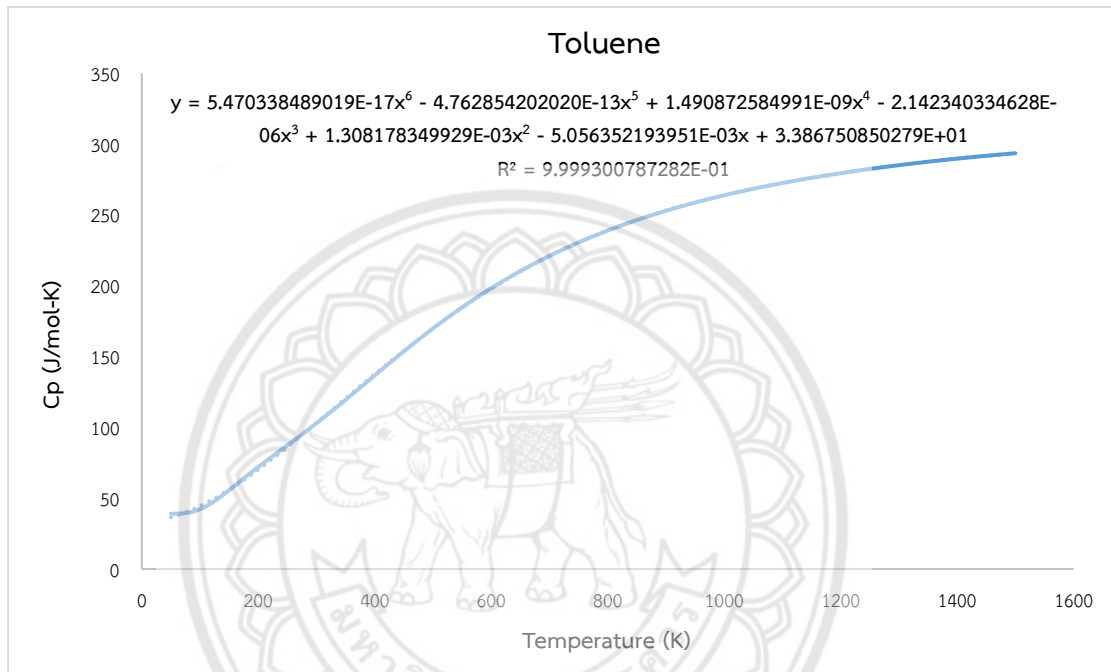
ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1007	264513.1	264.5131
1021.5	265874.7	265.8747
1036	267191.6	267.1916
1050.5	268465.5	268.4655
1065	269698.1	269.6981
1079.5	270891.1	270.8911
1094	272046	272.046
1108.5	273164.2	273.1642
1123	274247.3	274.2473
1137.5	275296.6	275.2966
1152	276313.3	276.3133
1166.5	277298.7	277.2987
1181	278254	278.254
1195.5	279180.3	279.1803
1210	280078.8	280.0788
1224.5	280950.4	280.9504
1239	281796.3	281.7963
1253.5	282617.2	282.6172
1268	283414.2	283.4142
1282.5	284188.1	284.1881
1297	284939.8	284.9398
1311.5	285670	285.67
1326	286379.5	286.3795
1340.5	287069.2	287.0692
1355	287739.6	287.7396
1369.5	288391.4	288.3914
1384	289025.4	289.0254
1398.5	289642.1	289.6421
1413	290242.1	290.2421
1427.5	290826	290.826
1442	291394.4	291.3944
1456.5	291947.7	291.9477
1471	292486.6	292.4866

ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1500	293522.6	293.5226

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)



รูปที่ ข.1 ความจุความร้อนจำเพาะของโทลูอินที่อุณหภูมิต่างๆ

ตารางที่ ข.2 ความจุความร้อนจำเพาะของไฮโดรเจนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
50	38142	38.142
99.5	31317.8	31.3178
149	30040.3	30.0403
198.5	29591.4	29.5914
248	29383.2	29.3832
297.5	29270	29.27
347	29201.7	29.2017
396.5	29157.4	29.1574
446	29127.6	29.1276
495.5	29108	29.108
545	29097.3	29.0973
594.5	29096.5	29.0965
644	29107.4	29.1074
693.5	29132.8	29.1328
743	29175.3	29.1753
792.5	29237.1	29.2371
842	29319.7	29.3197
891.5	29423.8	29.4238
941	29549.5	29.5495
990.5	29696	29.696
1040	29862	29.862
1089.5	30045.7	30.0457
1139	30245.2	30.2452
1188.5	30458.2	30.4582
1238	30682.7	30.6827
1287.5	30916.4	30.9164
1337	31157.2	31.1572
1386.5	31403.3	31.4033
1436	31652.8	31.6528
1485.5	31904.1	31.9041
1535	32155.9	32.1559
1584.5	32406.8	32.4068

ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1634	32655.8	32.6558
1683.5	32902.1	32.9021
1733	33144.8	33.1448
1782.5	33383.3	33.3833
1832	33617.1	33.6171
1881.5	33845.8	33.8458
1931	34069.1	34.0691
1980.5	34286.8	34.2868
2030	34498.6	34.4986
2079.5	34704.6	34.7046
2129	34904.6	34.9046
2178.5	35098.6	35.0986
2228	35286.6	35.2866
2277.5	35468.8	35.4688
2327	35645.2	35.6452
2376.5	35815.8	35.8158
2426	35980.9	35.9809
2475.5	36140.5	36.1405
2525	36294.8	36.2948
2574.5	36443.9	36.4439
2624	36588	36.588
2673.5	36727.2	36.7272
2723	36861.7	36.8617
2772.5	36991.6	36.9916
2822	37117.1	37.1171
2871.5	37238.4	37.2384
2921	37355.5	37.3555
2970.5	37468.7	37.4687
3020	37578	37.578
3069.5	37683.7	37.6837
3119	37785.8	37.7858
3168.5	37884.5	37.8845

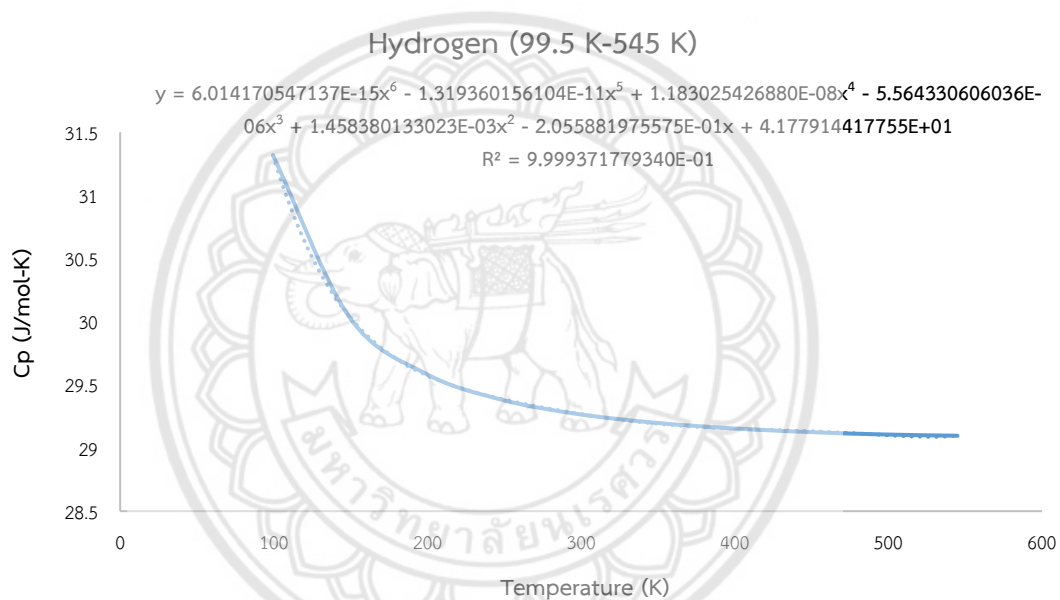
ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
3218	37979.9	37.9799
3267.5	38072.2	38.0722
3317	38161.4	38.1614
3366.5	38247.7	38.2477
3416	38331.2	38.3312
3465.5	38411.9	38.4119
3515	38490.1	38.4901
3564.5	38565.7	38.5657
3614	38639	38.639
3663.5	38709.9	38.7099
3713	38778.6	38.7786
3762.5	38845.2	38.8452
3812	38909.7	38.9097
3861.5	38972.2	38.9722
3911	39032.7	39.0327
3960.5	39091.5	39.0915
4010	39148.5	39.1485
4059.5	39203.7	39.2037
4109	39257.3	39.2573
4158.5	39309.4	39.3094
4208	39359.9	39.3599
4257.5	39408.9	39.4089
4307	39456.6	39.4566
4356.5	39502.8	39.5028
4406	39547.8	39.5478
4455.5	39591.4	39.5914
4505	39633.9	39.6339
4554.5	39675.1	39.6751
4604	39715.2	39.7152
4653.5	39754.3	39.7543
4703	39792.2	39.7922
4752.5	39829.2	39.8292

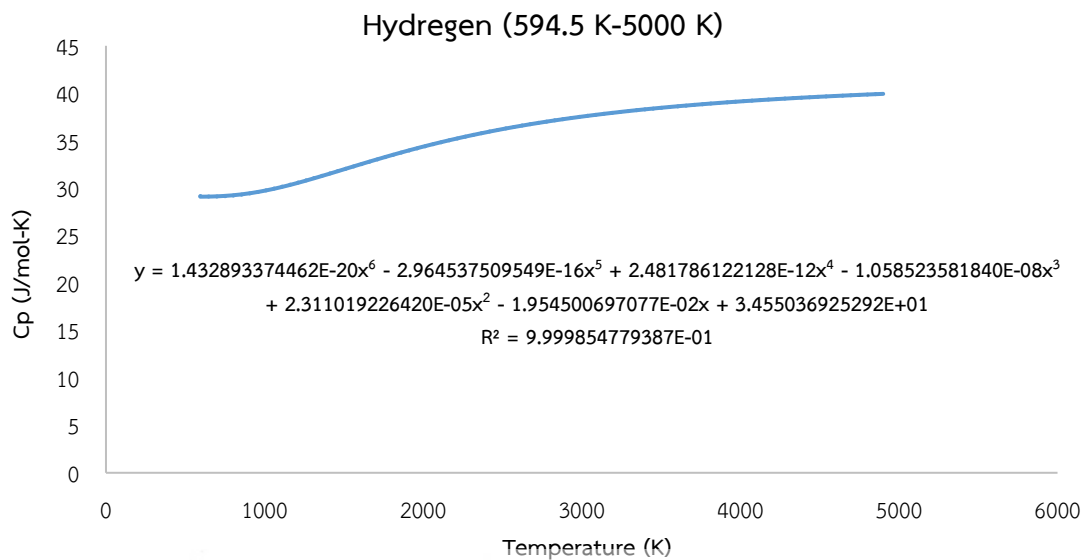
ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
4802	39865.1	39.8651
4851.5	39900.1	39.9001
4901	39934.1	39.9341
5000	39999.6	39.9996

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)



รูปที่ ข.2 ความจุความร้อนจำเพาะของไฮโดรเจนที่อุณหภูมิ 99.5-545 K



รูปที่ ข.3 ความจุความร้อนจำเพาะของไฮโดรเจนที่อุณหภูมิ 594.5-5000 K

ตารางที่ ข.3 ความจุความร้อนจำเพาะของเบนซีนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
50	33548.8	33.5488
64.5	33559.1	33.5591
79	33649.3	33.6493
93.5	33997.6	33.9976
108	34833	34.833
122.5	36323.9	36.3239
137	38519.4	38.5194
151.5	41360.3	41.3603
166	44724.6	44.7246
180.5	48471.8	48.4718
195	52473.6	52.4736
209.5	56628	56.628
224	60862.4	60.8624
238.5	65130.1	65.1301
253	69403.9	69.4039
267.5	73669.6	73.6696

ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
282	77921.4	77.9214
296.5	82156.8	82.1568
311	86375.2	86.3752
325.5	90575.1	90.5751
340	94754.5	94.7545
354.5	98909.5	98.9095
369	103035.5	103.0355
383.5	107126.6	107.1266
398	111176.6	111.1766
412.5	115178.6	115.1786
427	119126.1	119.1261
441.5	123012.7	123.0127
456	126832.5	126.8325
470.5	130580.1	130.5801
485	134250.8	134.2508
499.5	137840.6	137.8406
514	141346.4	141.3464
528.5	144765.5	144.7655
543	148096	148.096
557.5	151336.7	151.3367
572	154486.7	154.4867
586.5	157546	157.546
601	160514.8	160.5148
615.5	163393.7	163.3937
630	166183.6	166.1836
644.5	168885.9	168.8859
659	171502.1	171.5021
673.5	174033.8	174.0338
688	176482.9	176.4829
702.5	178851.6	178.8516
717	181141.7	181.1417
731.5	183355.6	183.3556

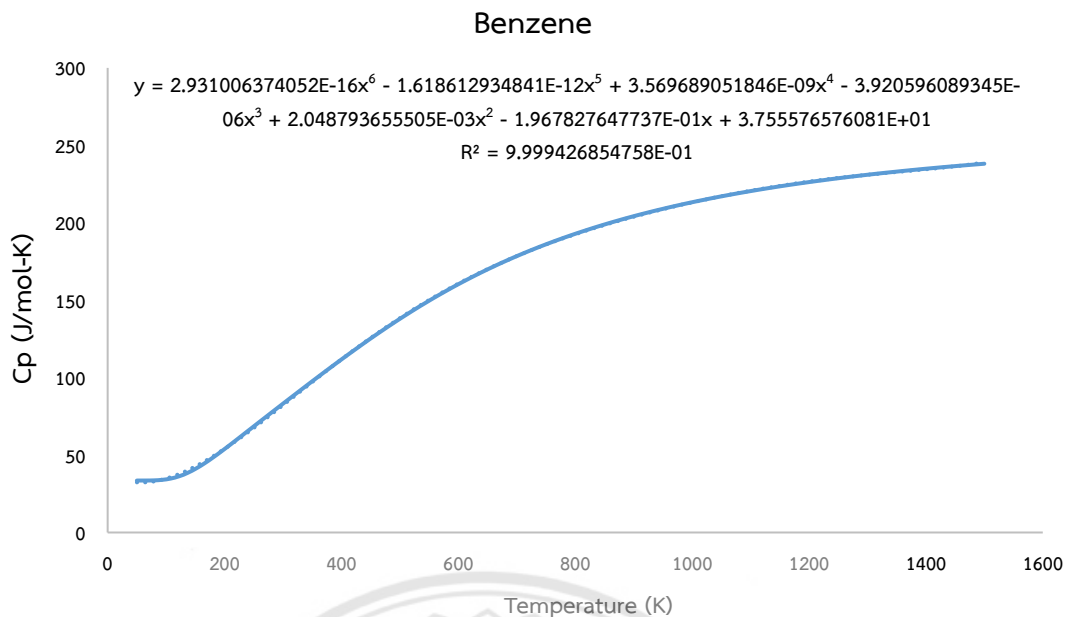
ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
746	185495.4	185.4954
760.5	187563.4	187.5634
775	189561.8	189.5618
789.5	191493	191.493
804	193359	193.359
818.5	195162.2	195.1622
833	196904.6	196.9046
847.5	198588.6	198.5886
862	200216	200.216
876.5	201789	201.789
891	203309.6	203.3096
905.5	204779.7	204.7797
920	206201	206.201
934.5	207575.6	207.5756
949	208905	208.905
963.5	210191.1	210.1911
978	211435.3	211.4353
992.5	212639.4	212.6394
1007	213804.7	213.8047
1021.5	214932.9	214.9329
1036	216025.2	216.0252
1050.5	217083	217.083
1065	218107.6	218.1076
1079.5	219100.2	219.1002
1094	220062.1	220.0621
1108.5	220994.4	220.9944
1123	221898.2	221.8982
1137.5	222774.5	222.7745
1152	223624.5	223.6245
1166.5	224448.9	224.4489
1181	225248.8	225.2488
1195.5	226025.1	226.0251

ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1210	226778.6	226.7786
1224.5	227510.2	227.5102
1239	228220.6	228.2206
1253.5	228910.6	228.9106
1268	229580.9	229.5809
1282.5	230232.2	230.2322
1297	230865.3	230.8653
1311.5	231480.6	231.4806
1326	232079	232.079
1340.5	232660.8	232.6608
1355	233226.8	233.2268
1369.5	233777.4	233.7774
1384	234313.2	234.3132
1398.5	234834.7	234.8347
1413	235342.4	235.3424
1427.5	235836.6	235.8366
1442	236318	236.318
1456.5	236786.8	236.7868
1471	237243.6	237.2436
1500	238122.4	238.1224

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)



รูปที่ ข.4 ความจุความร้อนจำเพาะของเบนซีนที่อุณหภูมิต่างๆ

ตารางที่ ข.4 ความจุความร้อนจำเพาะของมีเทนที่อุณหภูมิต่างๆ ณ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
50	33407.2	33.4072
99.5	33407.2	33.4072
149	33410.5	33.4105
198.5	33491.3	33.4913
248	33937.3	33.9373
297.5	35099.4	35.0994
347	37103.5	37.1035
396.5	39814.6	39.8146
446	42970.8	42.9708
495.5	46310.8	46.3108
545	49636.9	49.6369
594.5	52828.4	52.8284
644	55827.4	55.8274
693.5	58619.7	58.6197
743	61215.3	61.2153

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
792.5	63636.2	63.6362
842	65907	65.907
891.5	68050.9	68.0509
941	70087.4	70.0874
990.5	72031.7	72.0317
1040	73895.3	73.8953
1089.5	75686.3	75.6863
1139	77410.5	77.4105
1188.5	79071.6	79.0716
1238	80672.4	80.6724
1287.5	82214.5	82.2145
1337	83699.4	83.6994
1386.5	85128.2	85.1282
1436	86501.9	86.5019
1485.5	87821.5	87.8215
1535	89088.2	89.0882
1584.5	90303.2	90.3032
1634	91467.8	91.4678
1683.5	92583.5	92.5835
1733	93651.8	93.6518
1782.5	94674.3	94.6743
1832	95652.5	95.6525
1881.5	96588.2	96.5882
1931	97483.1	97.4831
1980.5	98338.7	98.3387
2030	99156.8	99.1568
2079.5	99939.07	99.93907
2129	100687	100.687
2178.5	101402.3	101.4023
2228	102086.3	102.0863
2277.5	102740.6	102.7406
2327	103366.6	103.3666

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

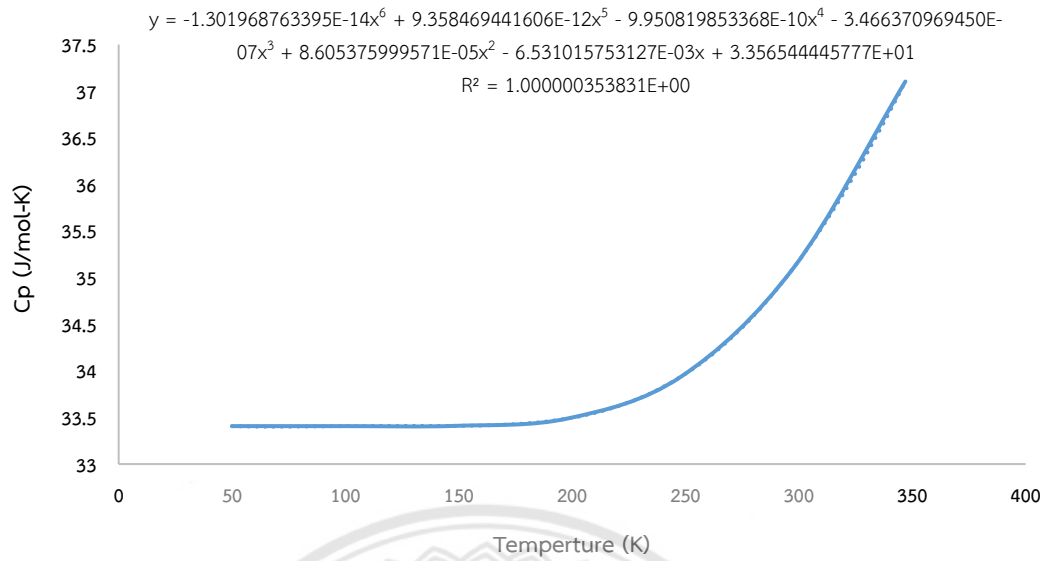
อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
2376.5	103965.6	103.9656
2426	104538.9	104.5389
2475.5	105087.8	105.0878
2525	105613.5	105.6135
2574.5	106117	106.117
2624	106599.6	106.5996
2673.5	107062.1	107.0621
2723	107505.7	107.5057
2772.5	107931.1	107.9311
2822	108339.3	108.3393
2871.5	108731.2	108.7312
2921	109107.4	109.1074
2970.5	109468.8	109.4688
3020	109816.1	109.8161
3069.5	110149.9	110.1499
3119	110470.9	110.4709
3168.5	110779.7	110.7797
3218	111076.9	111.0769
3267.5	111362.9	111.3629
3317	111638.3	111.6383
3366.5	111903.7	111.9037
3416	112159.4	112.1594
3465.5	112405.9	112.4059
3515	112643.6	112.6436
3564.5	112872.8	112.8728
3614	113094.1	113.0941
3663.5	113307.7	113.3077
3713	113514	113.514
3762.5	113713.2	113.7132
3812	113905.7	113.9057
3861.5	114091.8	114.0918
3911	114271.7	114.2717

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

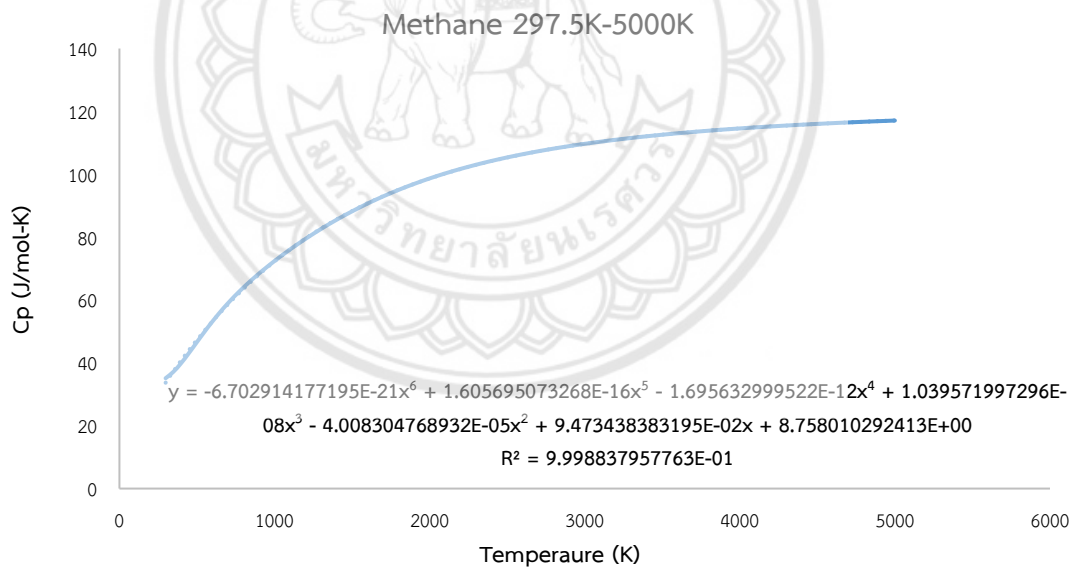
อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
3960.5	114445.7	114.4457
4010	114614	114.614
4059.5	114777	114.777
4109	114934.7	114.9347
4158.5	115087.4	115.0874
4208	115235.4	115.2354
4257.5	115378.7	115.3787
4307	115517.7	115.5177
4356.5	115652.4	115.6524
4406	115783	115.783
4455.5	115909.7	115.9097
4505	116032.6	116.0326
4554.5	116151.9	116.1519
4604	116267.8	116.2678
4653.5	116380.2	116.3802
4703	116489.5	116.4895
4752.5	116595.6	116.5956
4802	116698.8	116.6988
4851.5	116799	116.799
4901	116896.5	116.8965
5000	117083.5	117.0835

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)

Methane 50 K-347 K



รูปที่ ข.5 ความจุความร้อนจำเพาะของมีเทนที่อุณหภูมิ 50-347 K



รูปที่ ข.6 ความจุความร้อนจำเพาะของมีเทนที่อุณหภูมิ 297.5-5000 K

ตารางที่ ข.5 ความจุความร้อนจำเพาะของโพลิฟิลที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
200	109001.400	109.001
213	115217.500	115.218
226	122044.600	122.045
239	129346.800	129.347
252	136993.200	136.993
265	144864.400	144.864
278	152857.200	152.857
291	160884.900	160.885
304	168878.300	168.878
317	176783.300	176.783
330	184559.500	184.560
343	192178.400	192.178
356	199620.700	199.621
369	206874.800	206.875
382	213934.800	213.935
395	220799.400	220.799
408	227470.200	227.470
421	233951.500	233.952
434	240248.500	240.249
447	246367.600	246.368
460	252315.600	252.316
473	258099.300	258.099
486	263725.500	263.726
499	269200.700	269.201
512	274531.000	274.531
525	279722.200	279.722
538	284779.700	284.780
551	289708.500	289.709
564	294513.000	294.513
577	299197.600	299.198
590	303766.000	303.766
603	308221.900	308.222

ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
616	312568.500	312.569
629	316809.000	316.809
642	320946.300	320.946
655	324982.900	324.983
668	328921.600	328.922
681	332764.700	332.765
694	336514.600	336.515
707	340173.400	340.173
720	343743.400	343.743
733	347226.700	347.227
746	350625.100	350.625
759	353940.800	353.941
772	357175.700	357.176
785	360331.600	360.332
798	363410.400	363.410
811	366413.900	366.414
824	369344.000	369.344
837	372202.200	372.202
850	374990.500	374.991
863	377710.400	377.710
876	380363.700	380.364
889	382952.000	382.952
902	385476.900	385.477
915	387940.000	387.940
928	390342.900	390.343
941	392687.000	392.687
954	394974.000	394.974
967	397205.200	397.205
980	399382.100	399.382
993	401506.100	401.506
1006	403578.600	403.579
1019	405600.900	405.601

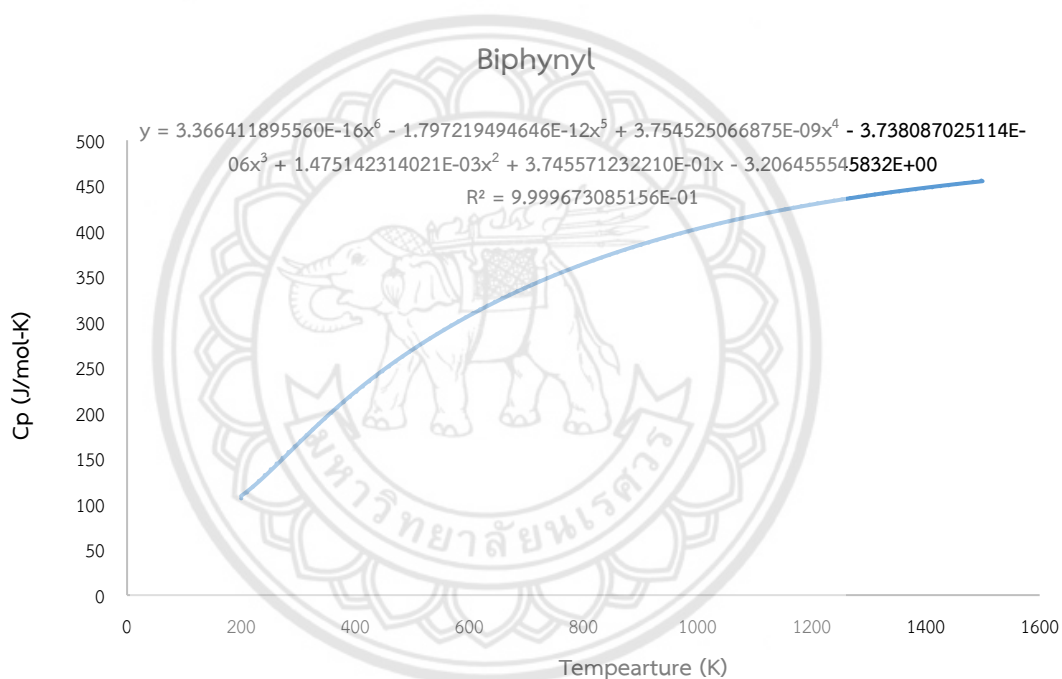
ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1032	407574.400	407.574
1045	409500.400	409.500
1058	411380.100	411.380
1071	413214.800	413.215
1084	415005.700	415.006
1097	416753.800	416.754
1110	418460.500	418.461
1123	420126.800	420.127
1136	421753.700	421.754
1149	423342.500	423.343
1162	424893.900	424.894
1175	426409.200	426.409
1188	427889.300	427.889
1201	429335.000	429.335
1214	430747.500	430.748
1227	432127.400	432.127
1240	433475.800	433.476
1253	434793.400	434.793
1266	436081.200	436.081
1279	437339.800	437.340
1292	438570.200	438.570
1305	439772.900	439.773
1318	440948.900	440.949
1331	442098.800	442.099
1344	443223.200	443.223
1357	444322.900	444.323
1370	445398.600	445.399
1383	446450.800	446.451
1396	447480.200	447.480
1409	448487.400	448.487
1422	449473.000	449.473
1435	450437.400	450.437

ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/kmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/mol-K)
1448	451381.400	451.381
1461	452305.400	452.305
1474	453210.000	453.210
1500	454962.600	454.963

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)

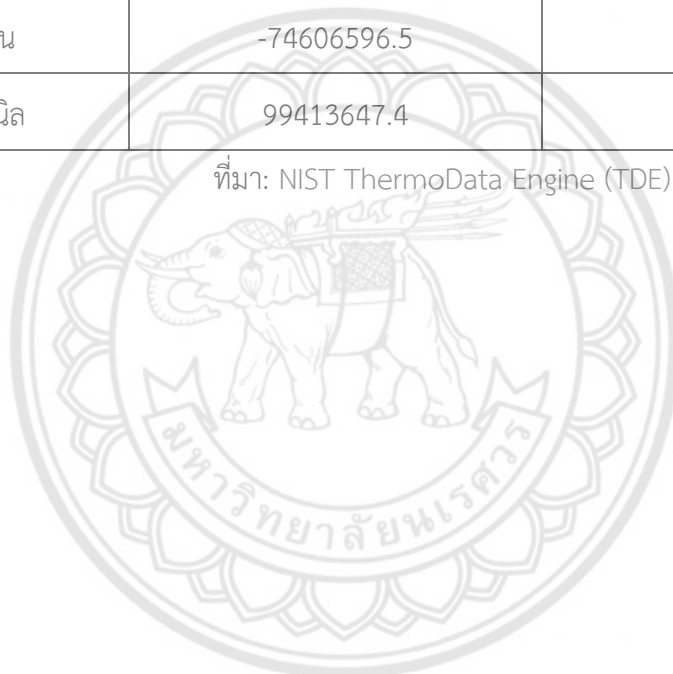


รูปที่ ข. ความจุความร้อนจำเพาะของไบฟีนิลที่อุณหภูมิต่างๆ

ตารางที่ ข.6 เอนทัลปีมาตรฐานของการเกิด (Standard enthalpy of formation, ΔH_f^0)

เอนทัลปีมาตรฐาน ของการเกิด (ΔH_f^0)	(J/kmol)	(J/mol)
โทลูอิน	50612807.5	50612.8075
ไฮโดรเจน	0	0
เบนซีน	82797857.5	82797.8575
มีเทน	-74606596.5	-74606.5965
ไบฟีนิล	99413647.4	99413.6474

ที่มา: NIST ThermoData Engine (TDE)



ตารางที่ ข.7 ความสัมพันธ์ของปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อ Conversion

		Temp								
	Conversion, Z	932.00	936.99	941.99	946.98	951.96	956.95	961.93	966.90	971.87
Pressure, Y	5	0.147	0.202	0.325	0.443	0.520	0.594	0.748	0.871	0.948
	10	0.169	0.258	0.358	0.467	0.556	0.643	0.704	0.794	0.882
	15	0.176	0.269	0.369	0.468	0.553	0.630	0.719	0.797	0.872
	20	0.180	0.275	0.372	0.463	0.541	0.634	0.712	0.792	0.870
	25	0.182	0.278	0.371	0.460	0.547	0.627	0.711	0.791	0.868
	30	0.183	0.278	0.367	0.458	0.543	0.627	0.711	0.791	0.868
	35	0.183	0.277	0.368	0.4561	0.542	0.627	0.709	0.789	0.867
	40	0.183	0.276	0.368	0.454	0.542	0.627	0.709	0.789	0.866
	45	0.183	0.275	0.365	0.455	0.542	0.627	0.709	0.788	0.866
	50	0.182	0.276	0.367	0.456	0.543	0.626	0.708	0.788	0.865

ตารางที่ ข.8 ความสัมพันธ์ของปัจจัยอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อปริมาตรของถังปฏิกรณ์

		Temp								
	Volume ,Z	931.996	936.993	941.986	946.977	951.963	956.947	961.926	966.902	972.000
Pressure ,Y	5	273.162	413.809	565.236	743.075	967.038	1327.864	1982.899	3814.081	62375.169
	10	95.577	146.303	199.841	292.717	345.081	469.471	701.061	1348.481	22052.952
	15	52.270	79.638	108.780	143.005	187.839	255.548	381.609	734.020	12004.107
	20	34.145	51.726	70.655	92.884	122.005	165.983	247.862	476.760	7796.896
	25	24.432	37.012	50.556	66.463	87.229	118.768	177.356	341.142	5579.005
	30	18.586	28.156	38.459	50.560	66.411	90.350	134.919	259.515	4244.093
	35	14.479	22.344	30.520	40.122	52.701	71.698	107.066	205.941	3367.943
	40	12.072	18.288	24.980	32.840	43.135	58.684	87.633	168.560	2756.619
	45	10.117	15.326	20.935	27.521	36.150	49.180	73.441	141.262	2310.191
	50	8.639	13.086	17.874	23.498	30.865	41.991	62.705	120.612	1972.476



ภาคผนวก ค
การตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม

ค. ข้อมูลที่ใช้ในการตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม [17]

(1) สภาวะถึงปฏิกรณ์ถึงปฏิกรณ์เคมีต่อเนื่อง

ความดัน	25	บาร์
อุณหภูมิ	933	เคลวิน

(2) สภาวะและอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้า

2.1) สาย 1

ความดัน	25	บาร์
อุณหภูมิ	873	เคลวิน
โทลูอิน	144	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไฮโดรเจน	735.4	กิโลโมลต่อชั่วโมง
เบนซีน	7.6	กิโลโมลต่อชั่วโมง
มีเทน	317.3	กิโลโมลต่อชั่วโมง

2.2) สาย 2

ความดัน	25.5	บาร์
อุณหภูมิ	315	เคลวิน
โทลูอิน	0.04	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไฮโดรเจน	25.2	กิโลโมลต่อชั่วโมง
เบนซีน	0.37	กิโลโมลต่อชั่วโมง
มีเทน	16.95	กิโลโมลต่อชั่วโมง

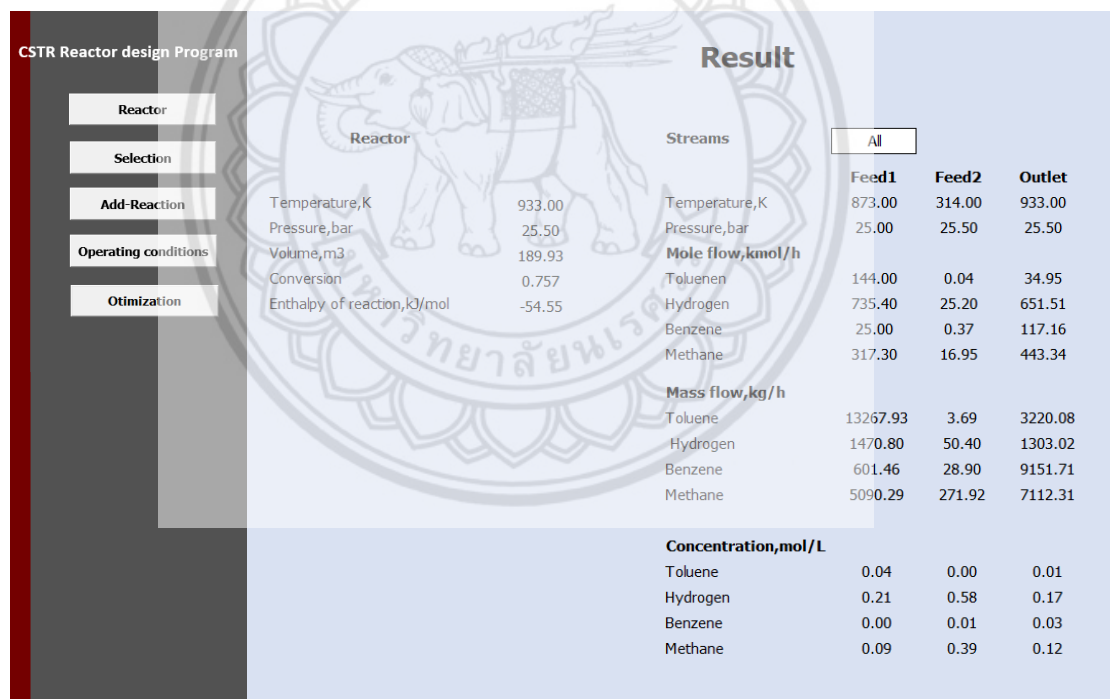
(3) อัตราการไหลเชิงโมลขาออก

โทลูอิน	36	กิโลโมลต่อชั่วโมง
ไฮโดรเจน	652.6	กิโลโมลต่อชั่วโมง
เบนซีน	116	กิโลโมลต่อชั่วโมง
มีเทน	442.3	กิโลโมลต่อชั่วโมง

(4) Conversion

$X = \text{โมลสารเบนซีนของผลิตภัณฑ์} / \text{โมลสารโทลูอินของสารตั้งต้นทั้งหมด}$

$$X = 0.75$$



The screenshot shows the 'CSTR Reactor design Program' interface. On the left is a navigation menu with options: Reactor, Selection, Add-Reaction, Operating conditions, and Optimization. The main area is titled 'Result' and displays data for a 'Reactor' and 'Streams'. The reactor parameters are: Temperature, K (933.00), Pressure, bar (25.50), Volume, m3 (189.93), Conversion (0.757), and Enthalpy of reaction, kJ/mol (-54.55). The streams table shows data for Feed1, Feed2, and Outlet across various parameters including Temperature, Pressure, Mole flow, Mass flow, and Concentration for Toluene, Hydrogen, Benzene, and Methane.

Reactor		Streams		
		Feed1	Feed2	Outlet
Temperature, K	933.00	873.00	314.00	933.00
Pressure, bar	25.50	25.00	25.50	25.50
Volume, m3	189.93			
Conversion	0.757			
Enthalpy of reaction, kJ/mol	-54.55			
		Mole flow, kmol/h		
		Toluene	0.04	34.95
		Hydrogen	25.20	651.51
		Benzene	0.37	117.16
		Methane	16.95	443.34
		Mass flow, kg/h		
		Toluene	3.69	3220.08
		Hydrogen	50.40	1303.02
		Benzene	28.90	9151.71
		Methane	271.92	7112.31
		Concentration, mol/L		
		Toluene	0.00	0.01
		Hydrogen	0.58	0.17
		Benzene	0.01	0.03
		Methane	0.39	0.12

รูปที่ ค.1 ผลลัพธ์ตรวจสอบข้อผิดพลาดของโปรแกรม

จากผลลัพธ์จากการรันโปรแกรม แสดงผลดังรูปที่ ค.1 พบว่าร้อยละ Conversion ที่โปรแกรมคำนวณมาได้เท่ากับ 75.7 จากผลลัพธ์ที่ได้มีความใกล้เคียงตามกับค่าที่นำมาอ้างอิง ซึ่งคิดเป็นเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนได้ 0.009