การจำลองกระบวนการวิศวกรรมเคมี : การใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อออกแบบกระบวนการ

Chemical Engineering Process Simulation : Using Simulation Software for Process Design

ณัฐชา เพ็ชร์ยิ้ม*

1. บทนำ

หลักสูตรวิศวกรรมศาสตรสาขาวิศวกรรมเคมีของมหาวิทยาลัยในประเทศไทยเกือบทั้งหมด จะมีรายวิชาบังคับเรียนที่คล้ายคลึงกัน เช่น เคมีพื้นฐาน (Basic Chemistry) ปรากฏการณ์การส่งผ่าน (Transport phenomena) เทอร์โมไดนามิกส์ (Thermodynamics) การปฏิบัติการหน่วย (Unit operations) เครื่องปฏิกรณ์เคมี (Reactors) หลักการและการคำนวณทางวิศวกรรมเคมี (Chemical Engineering Principle and Calculations) การออกแบบโรงงานด้านวิศวกรรมเคมี (Plant design) และวิชาอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้องทางด้านวิศวกรรมเคมี วิชาที่กล่าวมานั้นนักศึกษาจะเริ่มเรียนในชั้นปีที่ 2 และ 3 (สำหรับหลักสูตร 4 ปี) ในขณะที่วิชาการออกแบบโรงงานเป็นวิชาที่ต้องเรียนในชั้นปีที่ 4 เท่านั้น เนื่องจากเป็นวิชาที่รวมเอาเนื้อหาวิชาในชั้นปีที่ 2 และ 3 มาใช้ หากนักศึกษาไม่ได้ผ่านการศึกษาวิชาพื้นฐานมาก่อนจะไม่สามารถเข้าใจในวิชาการออกแบบโรงงานได้เลย

เมื่อประมาณ 15 ปีที่ผ่านมา วิชาการจำลองกระบวนการ (Process Simulation) ได้เริ่มมีการสอนในสถาบันอุดมศึกษา ซึ่งเป็นวิชาที่อาศัยโปรแกรมคอมพิวเตอร์ช่วยในการออกแบบและจำลองกระบวนการทางด้านอุตสาหกรรมเคมี ปิโตรเลียม และปิโตรเคมี

จากประสบการณ์สอนของผู้เขียนซึ่งเริ่มสอนวิชาการจำลองกระบวนการให้แก่นักศึกษาภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลธัญบุรีตั้งแต่ปี 2545 พบว่าวิชานี้ช่วยให้นักศึกษาชั้นปีที่ 3 มีความเข้าใจกระบวนการผลิตด้านอุตสาหกรรมเคมีมากขึ้น แม้ยังมิได้เรียนวิชาการออกแบบโรงงานก็ตามโดยเฉพาะอย่างยิ่งการออกแบบโรงงานหรือกระบวนการที่มีความซับซ้อนหรือระบบควบคุมกระบวนการรวมอยู่ด้วย การใช้คอมพิวเตอร์เพื่อการออกแบบกระบวนการก่อให้เกิดประโยชน์หลายประการ คือ

- ใช้คำนวณเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในการควบคุมกระบวนการให้มีประสิทธิภาพ
- ลดค่าใช้จ่ายในการสร้างโรงงานต้นแบบ (Pilot plant)
- ช่วยในการวางแผนการผลิตล่วงหน้า

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่นิยมใช้ในการจำลองกระบวนการแบบเชิงสถิต (Steady state) ได้แก่ Aspen Plus, HYSYS, PROII และ ChemCad ส่วนการเลือกใช้งานมักจะขึ้นกับผู้ใช้ว่าถนัดหรือเคยใช้โปรแกรมชนิดใดมาก่อน เช่นเดียวกันผู้เขียนที่ถนัดการใช้โปรแกรม Aspen Plus ดังนั้นในวิชาที่สอนจะเน้นการใช้ Aspen Plus อาจมีการประยุกต์ใช้งานร่วมกับโปรแกรมชนิดอื่นบ้าง เช่น Microsoft Excel, Fortran, Aspen Dynamics เป็นต้น

ในบทความนี้ต้องการแสดงให้ผู้ที่สนใจงานทางด้านการจำลองกระบวนการเห็นแนวทางการใช้งานโปรแกรม Aspen Plus ซึ่งแสดงไว้ในกรณีศึกษา (Case-Study) คือ กระบวนการผลิต Cyclohexane เพื่อทำให้เห็นการใช้งานของโปรแกรม Aspen Plus มากยิ่งขึ้น โดยจะอธิบายขั้นตอนการใช้งาน และผลที่ได้จากการคำนวณของโปรแกรม

2. โปรแกรม Aspen Plus

จัดเป็นโปรแกรมที่นิยมใช้กันมากทั่วโลก โดย

* ภาควิชาวิศวกรรมเคมีและวัสดุ คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีราชมงคลธัญบุรี
E-mail: p_nattacha@hotmail.com

บริษัท AspenTech, Inc. ประเทศสหรัฐอเมริกาเป็นผู้ผลิตขึ้น ในบทความนี้ใช้โปรแกรม Aspen Plus V. 2006 แต่รุ่นล่าสุดคือ V.7 พึ่งวางจำหน่ายไปเมื่อต้นเดือนพฤศจิกายน พ.ศ. 2551 ขั้นตอนการใช้งานแบ่งออกเป็น 5 ขั้นตอน

1) การสร้าง Process flowsheet

- กำหนดอุปกรณ์ที่ใช้ในกระบวนการทั้งหมด
- กำหนดกระแสการไหล (streams) ที่จะเชื่อมต่อไปยังแต่ละอุปกรณ์ในกระบวนการ
- เลือกแบบจำลองของอุปกรณ์จาก Aspen Plus Model Library แล้ววางบน Process flowsheet
- ตั้งชื่อกระแสการไหลที่อยู่บน process flowsheet และเชื่อมต่อเข้ากับแต่ละอุปกรณ์

2) ระบุองค์ประกอบ (chemical components) ทั้งหมดที่ใช้ในกระบวนการ โดยเลือกจาก Aspen Plus databanks หรือ เราสามารถระบุเอง

3) ระบุวิธีการที่จะใช้คำนวณหาคุณสมบัติทางกายภาพ (Physical properties) ขององค์ประกอบที่ผสมอยู่ในกระบวนการ

4) กระแสการไหลที่ป้อนเข้ากระบวนการ (Feed) ต้องระบุ องค์ประกอบ อัตราการไหล อุณหภูมิ และความดัน

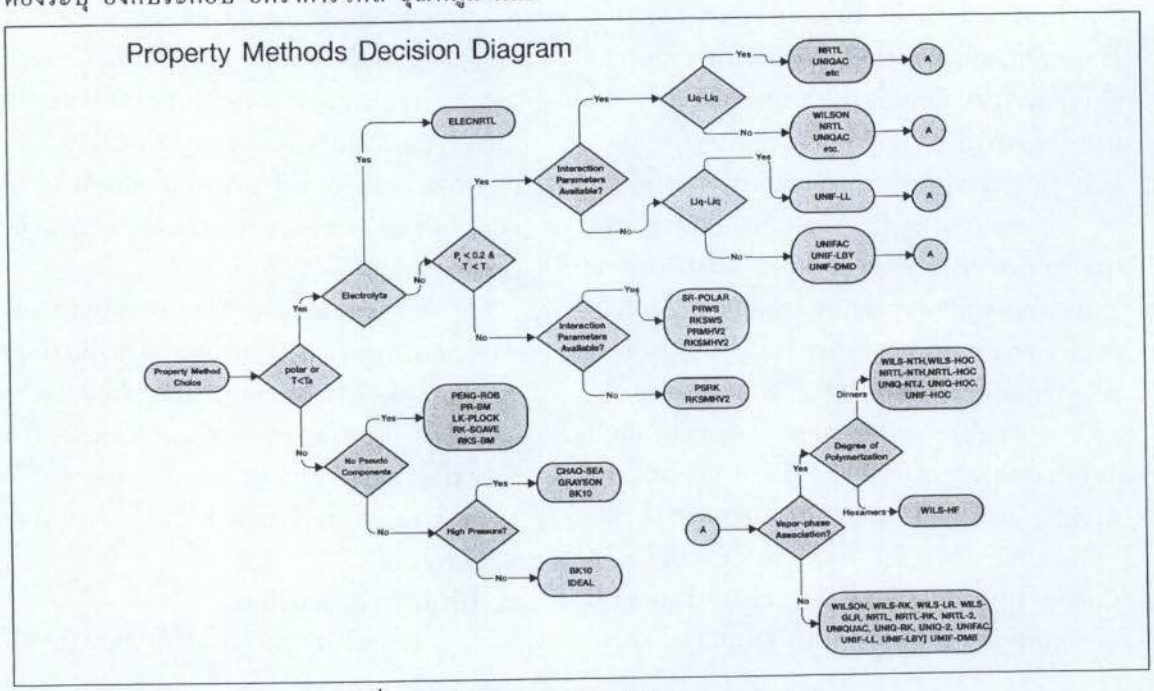
5) ระบุสภาวะ (Operating conditions) สำหรับแต่ละอุปกรณ์ในกระบวนการ

เมื่อทำครบทั้ง 5 ขั้นตอนแล้วก็สั่งให้โปรแกรมคำนวณ (RUN) หาค่าต่าง ๆ ของกระบวนการออกมา โดยผลการคำนวณของโปรแกรม Aspen Plus เป็นแบบสมดุลมวล (Material balance) ในสภาวะเชิงสถิต (steady state)

3. กรณีศึกษาการผลิต Cyclohexane

การเลือก Property method เป็นสิ่งสำคัญในการจำลองกระบวนการเป็นอย่างมาก เนื่องจากความถูกต้องของการคำนวณขึ้นอยู่กับวิธีการคำนวณทางเทอร์โมไดนามิกส์ของสารในกระบวนการนั้น ๆ โดยจะเริ่มพิจารณาจากสารเคมีที่ใช้ในกระบวนการว่าเป็นชนิดมีขั้วหรือไม่มีขั้ว ความดันที่ใช้ในกระบวนการ สถานะของสาร ดังแสดงในรูปที่ 1

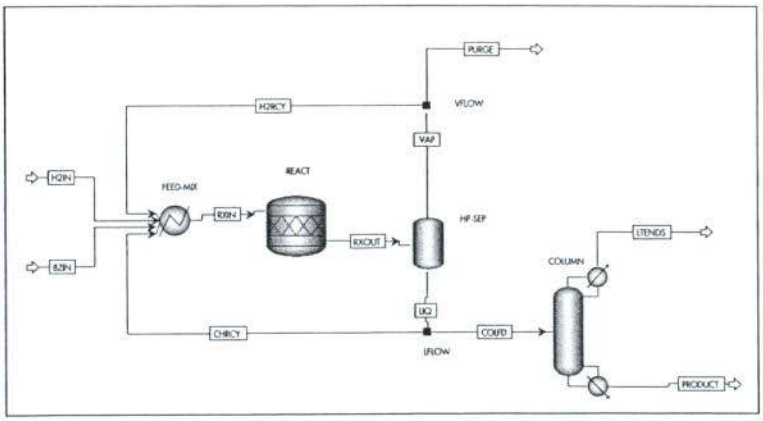
ในกระบวนการผลิต Cyclohexane นี้ ใช้วิธี RK-SOAVE เพื่อคำนวณ Physical property ส่วนข้อมูลของอุปกรณ์และแบบจำลองที่ใช้ของแต่ละเครื่องแสดงดังตารางที่ 1 และ 2 ตามลำดับ



รูปที่ 1 แผนผังแสดงการเลือกใช้ Property method

ตารางที่ 1
แสดงแบบจำลองของแต่ละอุปกรณ์

อุปกรณ์ในกระบวนการ	แบบจำลอง (Models)
FEED-MIX	Heater
REACT	RStoic
HP-SEP	Flash2
COLUMN	RadFrac
VFLOW	FSplit
LFLOW	FSplit



รูปที่ 2 Flowsheet ของกระบวนการผลิต Cyclohexane

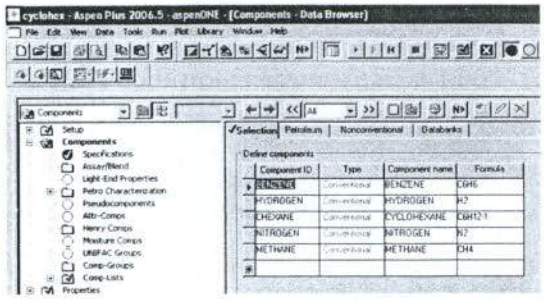
ตารางที่ 2 แสดงข้อมูลที่ป้อนในกระบวนการ

อุปกรณ์	ข้อมูลที่ป้อน (Input data)
FEED-MIX	T= 150 °C, P = 23 bar
REACT	T = 200 °C, Pdrop = 1 bar, Benzene conversion = 0.998
HP-SEP	T = 50 °C, Pdrop = 0.5 bar
VFLOW	92% ไหลในกระแส H2RCY
LFLOW	30% ไหลในกระแส CHRCY
COLUMN	จำนวนชั้นทางทฤษฎี = 12 ชั้น อัตราการป้อนกลับ (Reflux ratio) = 1.2 ชั้นป้อน (Feed stage) = 8 ความดันในหอ = 15 bar Partial condenser มีแต่ vapor distillate

สารตั้งต้นที่ใช้ในกระบวนการนี้จะแบ่งป้อนเป็น 2 กระแส คือ H2IN และ BZIN มีรายละเอียดดังตารางที่ 3

ตารางที่ 3 แสดงข้อมูลกระแสป้อน (Feed)

กระแส	ข้อมูล
H2IN	330 kmol/hr, T=50°C, P=25 bar สัดส่วนโมลของ H2=0.975, N2=0.005, CH4 = 0.02
BZIN	T= 40°C, P= 1 bar, อัตราการไหล Benzene 100 kmol/hr



รูปที่ 3 แสดงการป้อนสารเคมีที่ใช้ในกระบวนการ

กระบวนการผลิตCyclohexane เริ่มต้นจากการป้อนเบนซินกับไฮโดรเจนผ่าน FEED-MIX เพื่อให้ความร้อน มีปฏิกิริยาเกิด Cyclohexane ขึ้นเล็กน้อย จากนั้นป้อนเข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์เคมี ที่อุณหภูมิ 200°C เบนซินและไฮโดรเจนทำปฏิกิริยากันดังสมการ

$$C_6H_6(l) + 3H_2(g) \rightarrow C_6H_{12}(l)$$

ในกระแส RXOUT ส่วนใหญ่จะเป็นไฮโดรเจน 53.2% (โดยโมล) และ Cyclohexane 29.3% (โดยโมล) ที่เหลือจะเป็นเบนซิน 395 ppm ก๊าซมีเทน 13.6% (โดยโมล) และก๊าซไนโตรเจน 3.8% (โดยโมล) การแยก Cyclohexane ซึ่งเป็นของเหลวออกจากก๊าซ โดยการใช้ Separator (HP-SEP) แยกก๊าซไฮโดรเจนที่เหลือจากการทำปฏิกิริยาออกทางด้านบนแบ่ง 92% ของอัตราการไหลป้อนกลับไปที่ FEED-MIX เพื่อกลับไปทำปฏิกิริยาซ้ำ

	FEED	CHRCY							
Pressure bar	1.000	21.500	21.500	25.000	21.500	21.500	15.000	15.000	21.500
Vapor Frac	0.000	0.000	0.000	1.000	1.000	0.000	1.000	0.000	1.000
Mole Flow kmol/hr	100.000	43.480	101.454	330.000	332.899	144.935	1.938	99.457	28.948
Mass Flow kg/hr	7811.364	3597.797	8394.860	800.714	2497.918	11992.658	25.257	8369.603	217.210
Volume Flow cum/hr	9.097	4.825	11.257	359.679	420.342	16.082	3.039	14.766	36.551
Enthalpy MMkcal/hr	1.223	-1.556	-3.631	-0.058	-1.220	-5.187	-0.022	-2.862	-0.106
Mole Flow kmol/hr									
BENZENE	100.000	0.057	0.133		0.009	0.191	< 0.001	0.133	0.001
HYDROGEN		0.275	0.642	321.750	247.367	0.917	0.642	TRACE	21.510
CHEXANE		42.571	99.333		6.123	141.905	0.010	99.323	0.532
NITROGEN		0.055	0.129	1.650	17.496	0.184	0.129	TRACE	1.521
METHANE		0.522	1.217	6.600	61.904	1.738	1.217	< 0.001	5.333
Mole Frac									
BENZENE	1.000	0.001	0.001		26 PPM	0.001	13 PPM	0.001	26 PPM
HYDROGEN		0.006	0.006	0.975	0.743	0.006	0.321	4 PPB	0.743
CHEXANE		0.979	0.979		0.018	0.979	0.005	0.999	0.018

รูปที่ 4 แสดงผลการคำนวณจากโปรแกรม Aspen Plus

อีกครั้ง ส่วนด้านล่างของ HP-SEP ที่เป็นของเหลวจะแบ่ง 30% เข้าไปในกระแส CHRCY ที่เหลือนำไปเข้าหอกลั่นเพื่อแยก Cyclohexane ออกมาทางด้านล่างของหอกลั่น กระบวนการผลิต Cyclohexane แสดงดังรูปที่ 2

4. อภิปราย

หลังจาก Aspen Plus คำนวณเสร็จแล้ว และหากไม่มี error เกิดขึ้น จะแสดงข้อความ "Results Available" ก็สามารถดูผลการคำนวณโดยแบ่งออกเป็น 2 ส่วนใหญ่ๆ คือผลการคำนวณในกระแสต่าง ๆ กับผลการคำนวณในแต่ละอุปกรณ์ สำหรับกระบวนการผลิต Cyclohexane ในกรณีศึกษานี้ Cyclohexane ที่เป็นผลิตภัณฑ์ส่วนล่างของหอกลั่น (Bottom product) มีค่าเท่ากับ 99% (โดยโมล) Aspen Plus ยังสามารถแสดงค่า Heat duty ในหอกลั่นและเครื่องปฏิกรณ์เคมีให้เราทราบได้ด้วย

5. สรุป

การนำโปรแกรมคอมพิวเตอร์เข้าช่วยสอนนักศึกษาทำให้เห็นลักษณะของกระบวนการและการทำงานของอุปกรณ์ รวมทั้งปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการผลิตได้ง่ายขึ้น ถึงแม้ว่านักศึกษาจะยังไม่ได้เรียนวิชา Plant design มาเลยก็ตาม และหากเป็นนักศึกษาที่เคยเรียนวิชา Plant design มาแล้วก็ยิ่งเสริมความเข้าใจให้มากขึ้นจากการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ในการจำลองกระบวนการทางอุตสาหกรรมเคมี

6. เอกสารอ้างอิง

1. Mohammad A.W. and Takriff M.S., Using professional simulation software for better integration in the chemical engineering undergraduate curriculum. World Transactions on Engineering and Technology Education , Vol.2, No.2, 2003.

2. AspenTech Education Training Manual, Aspen Technology, Inc., 2007.

3. http\/ww.aspentech.com