การสร้างแบบจำลองและการชิมูเลตกระบวนการรีฟอร์มมิง

นายปฐมพงศ์ ปัญญาวิวานนท์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2533

ISBN 974-578-249-1

MODELING AND SIMULATION OF REFORMING PROCESS

Mr. Prathompong Panyavivanond

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering
Department of Chemical Engineering
Graduate School
Chulalongkorn University
1990

ISBN 974-578-249-1

Thesis Title	Modeling and Simulation of Reforming Process
By	Mr. Prathompong Panyavivanond
Department	Chemical Engineering
Thesis Advisor	Associate Professor Sutham Vanichseni, Ph.D.
Co Adivisor	Dr. Pailin Chuchottaworn

Accepted by the Graduated School, Chulalongkorn University in Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree.

..... Dean of Graduate School
(Professor Thavorn Vajrabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

..... Chairman
(Associate Professor Kroekchai Sukanjanatee, Ph.D.)

..... Member
(Associate Professor Wiwut Tanthapanichakoon, Ph.D.)

..... Member
(Pienpak Tassakorn, Ph.D.)

..... Member
(Pailin Chuchottaworn, Ph.D.)

..... Member
(Associate Professor Sutham Vanichseni, Ph.D.)

ปฐมพงศ์ ปัญญาวิวานนท์ : การสร้างแบบจำลองและการชิมูเลตกระบวนการรีฟอร์มมิง (MODELING AND SIMULATION OF REFORMING PROCESS) อ.ที่ปรึกษา : รศ.ดร. สุธรรม วาณิชเสนี, ดร. ไพรินทร์ ชูโชติถาวร, 160 หน้า. ISBN 974-578-249-1

แบบจำลองของกระบวนการรีฟอร์มมิงโดยใช้คะตาลิสต์ได้ถูกพัฒนาขึ้นในระบบของปฏิกรณ์แบบเบดนิ่ง ซึ่งมีแพลทินัมบนอลูมินาเป็นตัวคะตาลิสต์ภายใต้สภาวะปฏิบัติการแบบ Isothermal และ adiabatic สารป้อนเข้าเป็นไฮโดรคาร์บอนที่มีจำนวนคาร์บอน 6 ตัว และ คาร์บอน 7 ตัว แบบจำลองใหม่ได้ตั้งสมมุติฐานที่ว่าปฏิกิริยาระหว่างคาร์บอน 6 ตัว และ คาร์บอน 7 ตัวไม่ขึ้นแก่กัน ผลที่ได้จากการชิมูเลตได้เปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงพบว่าสอดคล้องกัน แบบจำลองที่พัฒนาขึ้นนี้สามารถที่จะถูกขยายไปใช้กับคะตาลิสต์ตัวอื่นโดยการหาค่าคงที่ของปฏิกิริยาจากการทดลอง โดยใช้สมาการอัตราเร็วของ Hougen-Watson วิธีการของแบบจำลองนี้อาจจะนำไปใช้ในการพัฒนาแบบจำลองของกระบวนการรีฟอร์มมิงโดยใช้คะตาลิสต์สำหรับจำนวนคาร์บอน 8 ถึง 10 ตัวได้

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2533

ลายมือชื่อนิสิต ปฐมพงศ์ ปัญญาวิวานนท์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

PRATHOMPONG PANYAVIVANOND : MODELING AND SIMULATION OF REFORMING PROCESS. THESIS ADVISOR : ASSO. PROF. SUTHAM VANICHSENI, Ph.D., PAILIN CHUCHOTTAWORN, Ph.D. 160 PP. ISBN 974-576-249-1

The modeling of a catalytic reforming process was developed for a system of a fixed-bed reactor with a commercial platinum on alumina type of catalyst under both isothermal and adiabatic mode of operation. The feedstock is limited to a mixture of C_6 and C_7 hydrocarbons. The new model is based on the assumption that the reaction of C_6 and C_7 are independent. The simulated results are in agreement with existing experimental data. The model can be extended to other catalysts by determining the rate constants from experiments using Hougen-Watson rate equations. This model approach may be applicable for the catalytic reforming model development of C_5-C_{10} feedstock.

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2533

ลายมือชื่อนิสิต ปฐมพงศ์ ปัญญาวิวานนท์
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา .....
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม .....

ACKNOWLEDGEMENTS

I wish to express my appreciation to Associate Professor Sutham Vanichseni and Dr. Pailin Chuchottaworn for his invaluable advice and general comments have been extremely helpful to this study. When the thesis was begun, I recieved valuable assistance from Dr. Pailin Chuchottaworn. There was the useful suggestion by Associate Professor Wiwat tanthapanichakoon and Dr. Pienpak Tassakorn. Special thanks are also due to all of my friends for their general help. Finally, the love, patience, and forebearance of my parents have been very important factors in making my thesis possible.

Prathompong Panyavivanond

Oct, 1990

TABLE OF CONTENTS

LIST OF TABLES

LIST OF FIGURES

page

page

NOMENCLATURE

A	Cross-section of reactor, m^2
ACH	Alkylcyclohexanes
ACP	Alkylcyclopentane
A_i	Frequency factor of reaction i
AR	Aromatics
Bz	Benzene
C	Carbon
C	Cracked products
C_i	Moles per mole of feed
C_j	Molar concentration of species j ($kmol/m^3$ fluid)
Cp_j	The heat capacity of species j, kcal/kg °C
C_5^-	Cracked product of C_5- hydrocarbons
C_6^-	Cracked product of C_6- hydrocarbons
22DMB	2,2-dimethylbutane
23DMB	2,3-dimethylbutane
E	Activation energy, kcal/kmol
F_{HC}	Molar feed rate of hydrocarbon at initial condition, kmol/hr
F_j	Molar flow rate of i^{th} component, kmol/hr
ΔG_f°	Standard Gibbs free energy of formation, kcal/g-mol
H	Hydrogen
H_j	Partial molar enthalpy of species j, kcal/kmol
k_f	Rate constant for forward reaction
k_r	Rate constant for reverse reaction
Kp	Equilibrium constant
kc'	Rate constant for paraffins

kc''	Rate constant for naphthenes
K	Equilibrium constant, constant in the adsorption term
IP	i-Paraffins
M_A	Molecular weight of aromatic (C_nH_{2n-6})
M_F	Molecular weight of feed
M_j	Molecular weight of species j
M_P	Molecular weight of paraffin (C_nH_{2n+2})
M_N	Molecular weight of naphthene (C_nH_{2n})
MCH	Methylcyclohexane
MBP7	Multibranched isoheptane
MCP	Methylcyclopentane
2MP	2-Methylpentane
3MP	3-Methylpentane
n	Number of carbon atoms
n_i	Mole of component i per mole of feed
nHEP	n-Heptane
nHEX	n-Hexane
n_m	Viscosity of gas mixture
NP	Normal paraffins
5N7	Five-ring naphthenes with seven carbon atom
p_i	Partial pressure of component i, bar
r_i	Rate of reaction of component i
R	Ideal gas constant, kcal/kmol K
R_j	Total rate of change of the amount of component j
SBP7	Single-branched isoheptane
T	Temperature, K, °C
T_c	Critical temperature
TOL	Toluene
u	Three-dimensional mass average velocity vector
u_s	Superficial velocity, m^3/m^2 hr
V_c	Critical volume, cm^3/mole

W	Weight of catalyst, kg
X_i	Fraction conversion
y_i	mole fraction of i in the mixture
Z	Axial reactor coordinate, $Z = \frac{W}{\rho_B A}$, m
Z_c	Critical compressibility factor

Greek Symbols

θ	Adsorption term for the metal function
$\mathcal{T}$	Adsorption term for the acid function
ρ_f	Fluid density, kg/m_f^3
ρ_B	Bulk density of the catalyst bed, kg cat./m^3
α_{ij}	Stoichiometric coefficient of component j in the ith reaction
λ	Thermal conductivity, kcal/m.hr °C
μ	Dipole moment, debyes
μ_r	Dimensionless dipole moment
ω	Acentric factor

Subcripts

A,B	With respect to A, B,.....
A-B	Reaction $A \rightleftharpoons B$
A	Aromatics
F	Feed
N	Naphthenes
P	Paraffins

Superscripts

o	Inlet condition, standard condition
B	Bed
f	fluid