

ปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชันของไฮโดรคาร์บอนผสมที่ประกอบด้วย 1,3 บิวทาไดอิน, ไฮโซบิวทีน 1-บิวทีน, 2-บิวทีน ไฮโซบิวเทน และนอร์มัลบิวเทน ได้คำนวณด้วยวิธีค่าพลังงานกิบส์ต่ำสุด ณ อุณหภูมิและความดันของการผลิต แบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์เคมีที่เหมาะสมมี 2 ลักษณะ ได้แก่ แบบจำลองปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชันของบิวทาไดอินเป็นบิวทีน และบิวเทนตามลำดับ และแบบจำลองปฏิกิริยาไฮโซเมอร์ไรเซชันต่อด้วยปฏิกิริยาไฮโดรจิเนชันของบิวทาไดอินเป็นบิวทีน และบิวเทนตามลำดับ การคำนวณสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของบิวทาไดอิน สัดส่วนการผลิตบิวทีนรวม และบิวเทนรวมได้ผลใกล้เคียงกับผลการผลิตภายใต้สภาวะเดียวกัน

การเกิดปฏิกิริยาของบิวทาไดอินเพิ่มขึ้น เมื่อเพิ่มอัตราส่วนของไฮโดรเจนต่อไฮโดรคาร์บอนผสม บิวทาไดอินเกิดปฏิกิริยาได้สมบูรณ์ เมื่ออัตราส่วนของไฮโดรเจนต่อไฮโดรคาร์บอนผสมมีค่าใกล้เคียงตามอัตราส่วนทางทฤษฎีสำหรับปฏิกิริยาบิวทาไดอินเป็นบิวทีน การเลือกเกิดบิวทีนและบิวเทน ได้คำนวณจากการปรับสัดส่วนของขนาดปริมาณบิวทีน และบิวเทนที่เปลี่ยนไปตามลำดับ เมื่อเพิ่มอัตราส่วนของไฮโดรเจนต่อไฮโดรคาร์บอนผสม การเลือกเกิดบิวทีนจะลดลง ในขณะที่การเลือกเกิดบิวเทนเพิ่มขึ้น แบบเอ็กโพเนนเชียล และการเลือกเกิดบิวเทนเพียงอย่างเดียวเกิดขึ้นได้ เมื่ออัตราส่วนไฮโดรเจนต่อไฮโดรคาร์บอนผสม มีค่าใกล้เคียงกับอัตราส่วนทางทฤษฎีสำหรับปฏิกิริยาบิวทาไดอินเป็นบิวเทน

Hydrogenation of mixed C_4 's containing 1,3 butadiene, i-butene, 1-butene, 2-butenes, i-butane and n-butane, was estimated by minimization of Gibbs free energy under actual operating pressure and temperature. Two approximate reactor models were hydrogenation of butadiene to butenes and butanes consecutively (HH), and isomerization of 1 – butene to 2 – butenes followed by hydrogenation of butadiene to butenes and butane respectively (IHH). The estimated of butadiene conversion and yields of butenes and butanes were quite agreed with the corresponding results obtained from actual operation.

Butadiene conversion was improved by increase in hydrogen to feed ratio. The complete conversion could be achieved the theoretical hydrogen to feed ratio for hydrogenation of butadiene to butenes. Selectivities of butenes and butanes were estimated by normalizing magnitude of butene and butane amounts changed respectively. With increase in hydrogen to feed ratio, the selectivity of butenes decreased, whereas the other increased exponentially. The selectivity of butanes reached unity at the theoretical hydrogen to feed ratio for hydrogenation of butadiene to butanes.