

ความไม่เสถียรจากความแตกต่างของการไหลในปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ในสถานะที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา

Differential Flow Instability in Packed-bed reactors in the Presence of Catalyst Deactivation

คำนำ

เครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น (packed bed reactor หรือ PBR) เป็นเครื่องปฏิกรณ์เคมี ซึ่งถูกใช้อย่างแพร่หลายทั้งในอุตสาหกรรมเคมีและปิโตรเคมี ตัวอย่างเช่น hydrogenation of paraffin, partial oxidation of methyl cyclohexane, oxidation of carbon monoxide ปฏิกรณ์เหล่านี้ถูกออกแบบการทำงานในสภาวะคงตัว แต่ในความเป็นจริงการที่จะทำให้ระบบอยู่ในสภาวะคงตัวตลอดนั้นทำได้ยาก สาเหตุจากการถูกรบกวนจากปัจจัยภายในและภายนอก (ปัจจัยภายใน ได้แก่ อัตราการไหลของสารป้อน ส่วนปัจจัยภายนอกเวลา ได้แก่ ตอนเปิด-ปิดเครื่อง หรือเปลี่ยนอัตราการไหลของสารป้อน) เครื่องปฏิกรณ์เหล่านี้มีพลวัตพฤติกรรมที่ค่อนข้างซับซ้อน (complex dynamic features) และยังไม่สามารถทำนายได้ด้วยแบบจำลองอย่างง่ายสำหรับสภาวะคงตัว การวิเคราะห์พฤติกรรมของระบบเหล่านี้ทำได้ค่อนข้างยากเนื่องจากเป็นระบบที่มีความสัมพันธ์ไม่เป็นเชิงเส้นสูง ความไม่เสถียรภาพเป็นตัวอย่างของปัญหาสภาวะคงตัวในปฏิกิริยาคายความร้อน การทำงานในสภาวะที่ไม่คงตัวของเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่นส่งผลให้เกิดพฤติกรรมทางความร้อนที่แตกต่างกัน แต่อย่างไรก็ตาม ความเข้าใจเกี่ยวกับความไม่เสถียรภาพและพลวัตพฤติกรรมในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ยังคงต้องมีการศึกษาเพิ่มเติมต่อไป ปรากฏการณ์ที่น่าสนใจเหล่านี้ได้แก่ คลื่นความร้อนก่อนสิ้นสุดปฏิกิริยา (pre-extinction waves), ผลของการกำทอน (resonance effect), wrong-way behavior (Crider and Foss 1966), differential-flow instability (Yakhnin *et al* 1995), chaotic behavior, traveling waves, bifurcation behavior (Jensen and Ray, 1982) ความเข้าใจในปรากฏการณ์เหล่านี้เป็นสิ่งจำเป็นในการพัฒนาความน่าเชื่อถือของระบบการควบคุมเครื่องปฏิกรณ์ (Jaree *et al* 2001)

มีงานวิจัยจำนวนมากที่ศึกษาเกี่ยวกับพฤติกรรมตอบสนองของปฏิกรณ์แบบอัดแน่นเมื่อมีการรบกวนของปัจจัยภายนอก เช่น อุณหภูมิ ความเข้มข้น หรืออัตราการไหลของสารป้อน พฤติกรรมทางความร้อนของปฏิกรณ์ชนิดนี้มักถูกอธิบายด้วยทฤษฎี (DIFI) อันเป็นผลมาจากความ

แตกต่างทางความเร็วของคลื่นความร้อนและความเร็วของคลื่นโมเลกุล (Rovinsky *et al* 1992) โดยความเร็วของคลื่นโมเลกุลจะเท่ากับความเร็วของอัตราการไหลของสารป้อนที่เข้า แต่ความเร็วของคลื่นความร้อนจะช้ากว่าเพราะถูกเพื่อกิ่งในปฏิกรณ์ดูดซับความร้อนเอาไว้ และเมื่อตัวกระตุ้นหรือคลื่นโมเลกุลมีอิทธิพลเหนือกว่าคลื่นความร้อนจะส่งผลให้อัตราการเพิ่มขึ้นของปฏิกิริยาสามารถก่อให้เกิดการเบี่ยงเบนของอุณหภูมิ ปฏิกิริยาคายความร้อนอันดับ 1 เป็นตัวแทนเพื่ออธิบายถึงพฤติกรรมตอบสนองสำหรับปฏิกรณ์ที่มีการรบกวนอุณหภูมิเป็นแบบ sine wave โดยใช้แบบจำลองคณิตศาสตร์แบบ Pseudo-homogeneous (Yakhnin *et al* 1998) เพราะว่าปรากฏการณ์นี้ขึ้นอยู่กับหลายๆ ปัจจัย นอกจากนั้นความเข้าใจถึงสาเหตุและลักษณะของปรากฏการณ์ยังสามารถถูกพัฒนาเพื่อที่จะหลีกเลี่ยงการดำเนินตามสถานการณ์ดังกล่าวได้อีกด้วย (Jaree *et al* 2001)

การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสิ่งที่หลีกเลี่ยงไม่ได้ที่จะเกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์ การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาก็มีส่วนร่วมในการขับเคลื่อนให้เกิดพฤติกรรมทางความร้อนดังกล่าว อัตราการเสื่อมสภาพมีหลายกลไกและขึ้นกับหลายปัจจัย เช่น ความเข้มข้นของสาร อุณหภูมิ เป็นต้น เนื่องจากเป็นที่ทราบกันว่า DIFI สามารถทำให้เกิดปรากฏการณ์ทางความร้อนขึ้นภายในปฏิกรณ์ซึ่งย่อมส่งผลต่ออัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนั้นงานวิจัยนี้จึงมุ่งประเด็นไปที่พฤติกรรมทางความร้อนของปฏิกรณ์แบบอัดแน่น (Packed Bed Reactor) ในขณะที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา และ DIFI เกิดขึ้นพร้อม ๆ กัน เพื่อทำความเข้าใจกับปรากฏการณ์และพัฒนาวิธีการใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาให้มีประสิทธิภาพให้ดียิ่งขึ้นรวมทั้งวิธีการป้องกันไม่ให้ตัวเร่งปฏิกิริยามีการเสื่อมสภาพเร็วเกินไป มีงานวิจัยจำนวนมากที่ศึกษาเกี่ยวกับพฤติกรรมดังกล่าว แต่อย่างไรก็ตามยังคงต้องมีการศึกษาเพิ่มเติมต่อไป

วัตถุประสงค์

1. ศึกษาปัจจัยที่มีผลต่อการเชื่อมสภาพตัวเร่งปฏิกิริยา
2. เปรียบเทียบความว่องไวของสารกระตุ้นที่มีการเชื่อมแบบปกติและแบบที่มีการรบกวน
3. ศึกษาปรากฏการณ์การกำทอนของคลื่นความร้อนเพื่อทำนายความถี่ธรรมชาติของระบบ
4. ศึกษาปรากฏการณ์การขยายที่ทำให้เกิดการกำทอนด้วยการรบกวนอุณหภูมิที่ทางเข้าเมื่อมีการเชื่อมสภาพตัวเร่งปฏิกิริยาที่เกิดขึ้น
5. ศึกษาปัจจัยที่ทำให้เกิดการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (pre-extinction wave)

ขอบเขตของงานวิจัย

ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ Pseudo-Homogeneous จำลองเหตุการณ์แล้วศึกษาผลกระทบที่มีต่อการเปลี่ยนแปลงทางความร้อนภายในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ที่มีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบจับปล้นและการเชื่อมสภาพแบบปกติ โดยปฏิกิริยาที่ใช้เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน เป็นปฏิกิริยาอันดับ 1

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. ทำให้เข้าใจปรากฏการณ์การเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น
2. ทราบวิธีการจัดการและควบคุมการใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาให้มีประสิทธิภาพมากขึ้น
3. สามารถหลีกเลี่ยงการดำเนินการที่สภาวะความเสี่ยงสูงต่อการเกิดความร้อนแรงหรืออุบัติเหตุ

การตรวจเอกสาร

กระบวนการทางเคมีในปัจจุบันมีมากมายและที่พบได้บ่อยในโรงงานเคมี คือเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ซึ่งเครื่องปฏิกรณ์ชนิดนี้ได้มีการใช้งานมานานแล้ว แต่ความเข้าใจเกี่ยวกับปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในเครื่องปฏิกรณ์นั้นยังมีน้อย บางปรากฏการณ์ที่ได้กล่าวมาแล้วในบทนำนั้น จะมีการวิเคราะห์และอธิบายเหตุผลด้วยหลักการหรือทฤษฎี เพื่อทำความเข้าใจเกี่ยวกับการใช้งานเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่นให้มีประสิทธิภาพยิ่งขึ้น โดยปัจจัยสำคัญที่ก่อให้เกิดปรากฏการณ์ Wrong-way behavior, Resonance Effect, Differential flow instability เหล่านี้ ได้แก่ ความจุความร้อนของบรรจุภัณฑ์ ฉนวนกันความร้อนระหว่างของไหลและบรรจุภัณฑ์, ความสูงของคลื่น (amplitude) และความถี่ของการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ ความไม่สม่ำเสมอของสารป้อนทั้งในแนวแกนและแนวรัศมี, การสูญเสียความร้อน, ความสามารถในการนำความร้อนที่ผนังและระดับของการคายความร้อนของปฏิกิริยา เป็นต้น

Wrong-way behavior

ในปฏิกรณ์แบบอัดแน่น มีพฤติกรรมทางความร้อนหลายอย่างที่ยังไม่เป็นที่เข้าใจอย่างแพร่หลาย ปรากฏการณ์บางอย่างได้ผลตอบสนองในทิศทางตรงกันข้ามกับที่คาดหมายจากการดำเนินงานที่สภาวะคงตัว เช่น การลดอุณหภูมิของสารป้อนอย่างรวดเร็วก่อให้เกิดอุณหภูมิของสารป้อนภายในเครื่องปฏิกรณ์สูงขึ้น

การลดลงของอัตราการใช้สารตั้งต้นก่อให้เกิดคลื่นของโมเลกุล ซึ่งคลื่นของความเข้มข้นนี้จะเคลื่อนที่ด้วยความเร็วเดียวกับอัตราการไหลของสารป้อน ในขณะที่คลื่นความร้อนจะเคลื่อนที่ช้ากว่า เพราะจะถูกจับไว้โดยแพ็คกิ้งเนื่องจากแพ็คกิ้งในเครื่องปฏิกรณ์มีค่าความจุความร้อน ทำให้อุณหภูมิที่จะผ่านไปยังตำแหน่งถัดไปในปฏิกรณ์ต้องสูญเสียค่าความร้อนไปยังแพ็คกิ้งเหล่านี้ด้วยลักษณะข้างต้นส่งผลให้เกิดการเพิ่มขึ้นของอัตราการเกิดปฏิกิริยาและอุณหภูมิที่สูงขึ้นกว่าสภาวะคงตัวเดิมสักครู่แล้วก็มีการลดลงมาอยู่ในสภาวะคงตัวใหม่ในเวลาต่อมา (Yakhnin and Menzinger 1998) สิ่งนี้เป็นที่รู้จักกันโดยทั่วไปว่า Wrong-way behavior และมีการศึกษาเชิงตัวเลข (Crider and Foss 1996) โดยใช้แบบจำลอง pseudo-homogeneous (เนื้อเดียว) แบบ 1 มิติ

Mehta *et al* (1981) ได้ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์แบบ 1-dimensional pseudo-homogeneous มีการไหลเป็นแบบ plug-flow ในการจำลองการลดอุณหภูมิของสารป้อนที่ทางเข้าทันทีทันใดโดยไม่คิดค่าการกระจายความร้อนในแกนและความต้านทานในการแพร่ระหว่างตัวเร่งปฏิกิริยากับของไหล พบว่าอุณหภูมิที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์สูงขึ้นชั่วคราวและลดลงในระยะเวลาต่อมา อย่างไรก็ตามการทดลองนี้ไม่ได้สนใจความต้านทานการแพร่ในแนวแกนของอุณหภูมิและความเข้มข้นระหว่างคะตลิสต์กับของไหล ดังนั้นจึงได้ผลการทำนายอุณหภูมิพุ่งขึ้นสูงมากอย่างไม่น่าจะเป็นจริง แต่แบบจำลองนี้ไม่สามารถทำนายปรากฏการณ์คลื่นก่อนการสิ้นสุดปฏิกิริยาถ้าระบบมีผลเฉลยคำตอบของสมการพลังงานและมวลมากกว่า 1 คำตอบ

Oh and Cavendish (1982) ได้ศึกษาพฤติกรรมตอบสนองของ automobile monolithic converters เมื่อมีการเพิ่มอุณหภูมิของสารป้อน โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์มาอธิบายกระบวนการแพร่มวล การถ่ายเทความร้อนและปฏิกิริยาเคมี เมื่อมีการลดลงของอุณหภูมิของสารป้อนทันทีทันใดจะสามารถสังเกตการตอบสนองในทางตรงกันข้ามได้ อย่างไรก็ตามถ้าอุณหภูมิของสารป้อนมีการเพิ่มขึ้นจะทำให้ปฏิกิริยาเกิดได้มากขึ้น โดยไม่มีปรากฏการณ์ wrong-way behavior

Chen and luss (1989) ศึกษาอิทธิพลของการถ่ายเทความร้อนระหว่างเฟส บนปรากฏการณ์ Wrong-way behavior โดยเปรียบเทียบแบบจำลองระหว่าง Pseudo-Homogeneous (1 เฟส) แบบ 1 มิติกับ Heterogeneous (2 เฟส) แบบ 1 มิติ และในระบบที่มีผลเฉลยของสมการมวลสารและพลังงาน 1 คำตอบจะให้ผลการทดลองที่เหมือนกัน กล่าวคืออุณหภูมิที่เพิ่มขึ้นชั่วคราวมีขนาดเท่ากัน ไม่ว่าจะใช้แบบจำลองแบบ Pseudo-Homogeneous หรือ Heterogeneous แต่ทั้ง 2 แบบจำลองจะให้ผลการทำนายที่ต่างกัน ถ้ามีระบบผลเฉลยของสมการมวลสารและพลังงานมากกว่า 1 คำตอบ อย่างไรก็ตามความเร็วของก๊าซระหว่างช่องแคบเล็กๆ ระหว่างเซลล์ที่เพิ่มสูงขึ้นจะเพิ่มอัตราการถ่ายเทความร้อนระหว่างเฟส และจะลดความแตกต่างในด้านพฤติกรรมทางความร้อนของทั้ง 2 แบบจำลอง

Jaree *et al* (2003) ทำการทดลองโดยใช้คาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) และมีคะตลิสต์ Pt/Al₂O₃ ร้อยละ 0.02 โดยนำหนักเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งบรรจุอยู่ในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น จากการทดลองสามารถแสดงพฤติกรรม wrong-way behavior ความไม่เสถียรจากความแตกต่างของการไหล ผลการทดลองสรุปได้ว่าการรบกวนอุณหภูมิที่ทางเข้าด้วยความถี่ต่ำๆ ไม่เป็นสาเหตุให้เกิดการเพิ่มของอุณหภูมิเนื่องจาก การดำเนินการที่ความถี่ต่ำๆ เหมือนการเปลี่ยนแปลงอย่างช้าๆ ในทางตรงกันข้ามถ้ารบกวนอุณหภูมิเข้าด้วยความถี่สูงๆ ระบบเหมือนมีการเปลี่ยนแปลงอย่าง

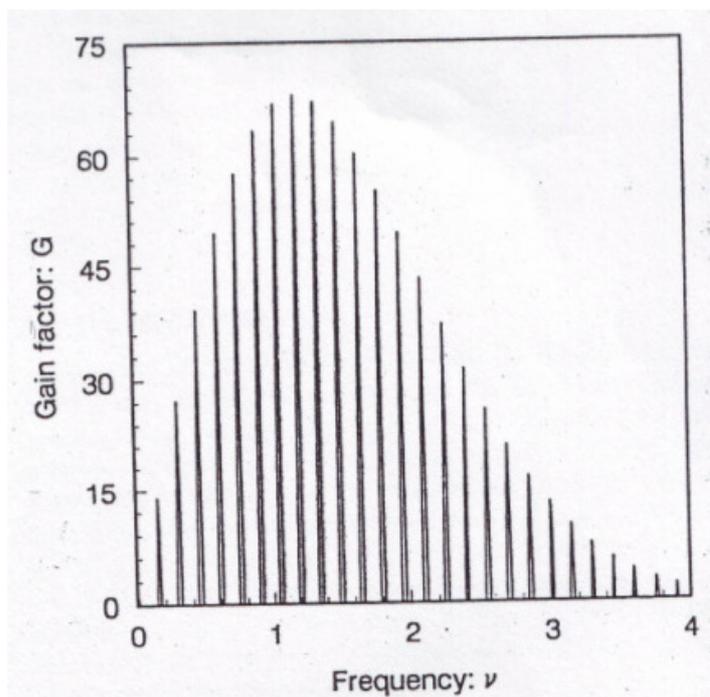
รวดเร็วจนตอบสนองไม่ทัน อย่างไรก็ตามความถี่ช่วงกลางๆ จะให้ค่า gain factor สูง (อุณหภูมิเพิ่มขึ้นมาก) และปรากฏการณ์นี้สามารถป้องกันได้ในระดับหนึ่ง โดยเพิ่มค่าการนำความร้อนตามแนวแกนหรือเพิ่มความเข้มข้นของตัวเร่งปฏิกิริยา

Resonance Effect

การกำหนดเป็นปรากฏการณ์การเพิ่มหรือเสริมกันของคลื่นซึ่งก่อให้เกิดการเพิ่มความสูงของคลื่น สาเหตุที่เกิดโดยความถี่ในการสั่นจะเข้าใกล้ความถี่ธรรมชาติ (natural frequency) เช่น การสั่นของเครื่องยนต์ซึ่งจะสังเกตได้ว่าบางครั้งเครื่องยนต์เดินรอบด้วยความเร็วต่ำ (ตอนรถหยุดกับที่) สั่นแรงแต่พอเร่งรอบเครื่องยนต์ให้สูงขึ้น (ตอนรถหยุดกับที่) แต่ความแรงในการสั่นกลับลดลงอันเนื่องมาจากความถี่ไม่ตรงกับความถี่ธรรมชาติของรถเลยไม่เกิดการเสริมกันของคลื่น

Abdul-Kareem *et al* (1980) ได้ทำการทดลองศึกษาผลของอุณหภูมิที่มีลักษณะเป็น Sine wave บน CO โดยมี V_2O_5 เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โดยทดลองสองสภาวะหลักๆ คือ สภาวะคงตัวและสภาวะไม่คงตัวหรือมีการเปลี่ยนแปลงโดยมีการรบกวนอุณหภูมิเป็นแบบ Sine wave ซึ่งจากการทดลองพบว่าเวลาเฉลี่ยที่ใช้การทำปฏิกิริยาของการรบกวนอุณหภูมิมิมีค่าต่ำกว่า ซึ่งสาเหตุมาจากพื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยาลดลง จึงทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยามีค่าต่ำลง

Yakhin *et al* (1998) ศึกษาปรากฏการณ์กำหนด จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกรณ์แบบอัดแน่นที่มีการรบกวนอุณหภูมิที่ทางเข้าด้วยความถี่ต่างๆ กัน โดยการนำค่าอุณหภูมิสูงสุดของสภาวะดำเนินการนั้นๆ ลบด้วยอุณหภูมิสูงสุด ณ สภาวะคงตัวแล้วหารด้วยความสูงของคลื่นที่ทางเข้าซึ่งเรียกว่า Gain Factor จากการศึกษาได้พบว่าบางช่วงของค่าความถี่นั้นได้มีค่าของ gain factor สูงขึ้นมาก ดังแสดงในภาพที่ 1 จากรูปสามารถอธิบายได้ว่าค่า gain factor ขึ้นอยู่กับความถี่ที่รบกวน ถ้าความถี่ที่รบกวนอุณหภูมิต่างของสารตั้งต้นมีค่าสูงมากๆ ระบบก็จะไม่ถูกรบกวน เพราะจุดสูงสุดของยอดคลื่นที่ต่อเนื่องกันใกล้กันมากๆ จะถูกทำให้มีผลน้อยลงโดยการแพร่ความร้อน ในทางตรงกันข้ามถ้าความถี่ต่ำมากๆ อุณหภูมิของระบบจะแกว่งอยู่ในช่วงค่าสูงสุดและต่ำสุดที่มีการรบกวน ที่ความถี่ระดับกลางจะเกิดการขยายตัวมากที่สุดหรือ gain factor สูงสุดซึ่งเรียกว่าปรากฏการณ์กำหนด (Resonance) ซึ่งต่อมาได้มีการทดลอง (Jaree *et al.*, 2003a) ใช้คาร์บอนมอนอกไซด์ (CO) และมีคะตาลิสต์ Pt/Al_2O_3 ในระบบที่แทบจะไม่มีผลสูญเสียความร้อน



ภาพที่ 1 ผลการกำหนดที่ความถี่ต่าง ๆ ในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น (Yakhnin และ Menzinger, 1998)

ที่มา: Yakhin *et al* (1998)

Moving Hot Spot

เครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่นในกรณีที่มีปฏิกิริยาคายความร้อนจะมีการตอบสนองที่ไวมาก เนื่องจากการที่คายความร้อนออกมาเป็นการเร่งปฏิกิริยาให้เกิดเร็วยิ่งขึ้น เช่น ถ้ารับกวนอุณหภูมิหรือความเข้มข้นของสารป้อนที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์นั้น จะก่อให้เกิดการเคลื่อนที่ของคลื่นด้วยความเร็วที่ช้ามากความร้อนไปสู่สภาวะคงตัวที่ตำแหน่งใหม่ ซึ่งปรากฏการณ์นี้แตกต่างปรากฏการณ์ผลตอบสนองในทางตรงกันข้าม (Wrong-way behavior) และปรากฏการณ์การกำทอน (Resonance Effect) แต่อาจเกิดร่วมกันได้

Yakhin *et al* (1998) อธิบายการเคลื่อนที่ของ Hot Spot ผ่านกลไกของความแตกต่างของความเร็วในการแพร่ของคลื่นความร้อนและคลื่นความเข้มข้น โดยที่ความเร็วในการแทรกซึมเข้าไปของคลื่นความเข้มข้นของสารป้อนมีค่ามากกว่าความเร็วในการแพร่ของคลื่นความร้อน ถ้าวัดค่าความเร็วของคลื่นโมเลกุลกับความเร็วของคลื่นความร้อนในปฏิกรณ์เปล่าๆ ที่ไม่มีแท่งกึ่งบรรจุอยู่ภายในจะได้ค่าความเร็วของทั้งสองคลื่นมีค่าเท่ากัน แต่ถ้าวัดความเร็วที่ทางออกในปฏิกรณ์ที่มีแท่งกึ่งบรรจุอยู่ จะได้ค่าที่ไม่เท่ากัน โดยค่าความเร็วของคลื่นโมเลกุลจะมีค่ามากกว่าค่าความเร็ว

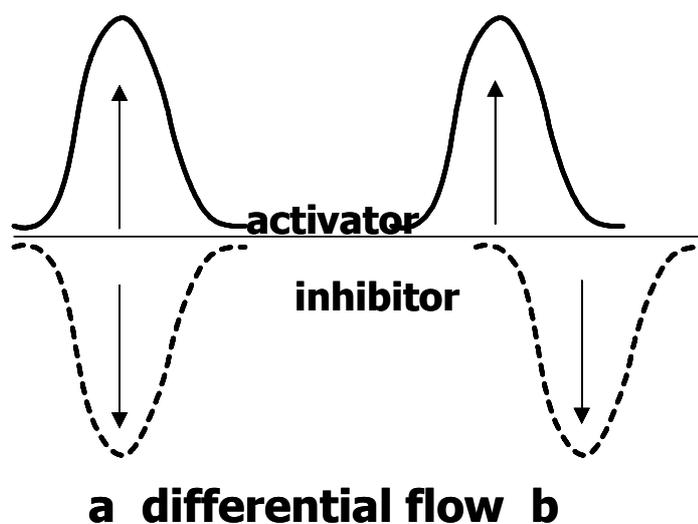
ของคลื่นความร้อน เนื่องจากความเร็วของคลื่น โมเลกุลจะไหลผ่านแพ็คกิ่งด้วยอัตราเร็วเท่ากับอัตราไหลของสารป้อน แต่คลื่นความร้อนจะถูกหน่วงไว้ด้วยแพ็คกิ่ง เพราะว่าแพ็คกิ่งมีคุณสมบัติกักเก็บความร้อนได้ และจากสาเหตุของความแตกต่างของอัตราเร็วของคลื่น โมเลกุลและคลื่นความร้อน เป็นสาเหตุทำให้มีการพุ่งขึ้นสูงของอุณหภูมิภายในปฏิกรณ์

Differential flow instability (DIFI)

ความไม่เสถียรจากความแตกต่างของการไหล (DIFI) มีศักยภาพในการที่จะขยายการรบกวนของตัวแปรขาเข้าปฏิกรณ์แบบอัดแน่น และในการที่จะสนับสนุนความแตกต่างในการเคลื่อนที่ของคลื่นอุณหภูมิและคลื่นความเข้มข้นให้ปรากฏเด่นชัดขึ้นมา (Rovinsky and Menzinger, 1992, 1993) จะมีเงื่อนไขสภาวะที่จำเป็นสำหรับการเกิดปรากฏการณ์ DIFI อยู่ 2 เงื่อนไข

เงื่อนไขแรกคือสภาวะทางจลศาสตร์ กล่าวคือ ปฏิริยาต้องประกอบด้วยการเกิดขึ้นเองของปฏิริยาหรือมีส่วนสนับสนุนให้เกิดปฏิริยาได้ดียิ่งขึ้น (ปฏิริยาคายความร้อน) หรือกล่าวอีกนัยหนึ่งว่า ระบบจะต้องมีทั้ง 2 ส่วน คือ ส่วนกระตุ้น (activator) เช่น ปฏิริยาคายความร้อนพอเกิดปฏิริยา ระบบก็จะคายความร้อนออกมา แล้วความร้อนที่ได้ก็จะไปกระตุ้นให้ปฏิริยาในระบบเกิดได้ดียิ่งขึ้น และอีกส่วนก็คือ ส่วนยับยั้ง (inhibitor) เช่น การหมดไปของสารตั้งต้น ถ้าในระบบสารตั้งต้นมีค่าลดน้อยลงปฏิริยาที่เกิดจะเกิดได้น้อยลง เงื่อนไขที่สองคือ ส่วนกระตุ้นและส่วนยับยั้งซึ่งทั้ง 2 ส่วนนี้ในช่วงเวลาปกติจะอยู่ในสภาวะที่สมดุลกัน แต่ถ้าเกิดมีอีกส่วนหนึ่งที่มีอิทธิพลเหนือกว่าอีกส่วนและอีกจะต้องมีความแตกต่างของการไหลระหว่างกันที่มีขนาดใหญ่เพียงพอ จะเรียกปรากฏการณ์นี้ว่า ความไม่เสถียรจากความแตกต่างของการไหล (DIFI)

นอกเหนือสภาวะข้างต้นแล้ว ยังมีเงื่อนไขเพิ่มเติมอีก คือจะต้องไม่มีการแพร่ของคลื่นโมเลกุลตามแนวแกนของปฏิกรณ์หรือมีได้เล็กน้อย โดยหลักการนี้เป็นปัจจัยสำคัญที่ทำให้เกิดการขยายปรากฏการณ์ DIFI ในปฏิกรณ์แบบอัดแน่น อีกทั้งยังสามารถอธิบายความไม่เสถียรภาพภายในปฏิกรณ์



ภาพที่ 2 (a) ส่วนกระตุ้นและส่วนยับยั้งอยู่ในสภาวะสมดุล (b) ส่วนกระตุ้นและส่วนยับยั้งที่เกิดปรากฏการณ์ DIFI

Catalyst deactivation

คะตาลิสต์ (catalyst) หรือตัวเร่งปฏิกิริยาโดยทั่วไปจะมีอยู่ 2 ส่วนที่สำคัญคือส่วนที่เป็นตัวรองรับและส่วนที่เป็นตัวองค์ประกอบกัมมันต์ โดยที่โลหะจะไปเกาะอยู่ที่บนผิวตัวรองรับเพื่อเพิ่มพื้นที่ผิวสัมผัสหรือพื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยา

เครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่นระหว่างที่มีการดำเนินการ จะเกิดการเสื่อมสภาพของปฏิกิริยา ซึ่งเป็นสิ่งที่มีอยู่มากที่สุดในกระบวนการคะตาไลติก (catalytic) เนื่องจากความร้อนจะถูกคายโดยผิวหน้าของปฏิกิริยา อัตราของกระบวนการคะตาไลติกก็จะสูญหายไป ซึ่งเป็นหนึ่งในปัจจัยที่นำไปสู่การไม่มีเสถียรภาพของความร้อนของระบบ โดยการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีส่วนช่วยในการเกิดพฤติกรรมทางความร้อน (thermal behavior) เช่น ปรากฏการณ์ DIFI ในการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาจะขึ้นอยู่กับความสามารถหรือพื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยาที่ลดลง การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาจะแบ่งได้เป็น 4 ประเภท (Butt and Petersen 1998) คือ

1. Poisoning
2. Coking
3. Vapor transport
4. Sintering

1. Poisoning เป็นการเสื่อมสภาพโดยที่มีสิ่งแปลกปลอมที่เป็นอันตรายต่อตัวเร่งปฏิกิริยาเข้ามาพร้อมกับสารตั้งต้น (feed) แล้วสิ่งแปลกปลอมหรือสารพิษจะไปเกาะบนผิวขององค์ประกอบกัมมันต์หรือทำปฏิกิริยากับตัวเร่งปฏิกิริยาทำให้คะตาลีสต์นั้น ทำให้พื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยาลดลง

2. Coking นั้นเกิดขึ้นเนื่องจากทำปฏิกิริยาแล้วจะมีจำพวกสารไฮโดรคาร์บอนหรือเขม่ามาเกาะอยู่บนผิวคะตาลีสต์หรือไปอุดที่รูพรุนของคะตาลีสต์ซึ่งเป็นการลดพื้นที่ผิวสัมผัส ทำให้ตัวเร่งปฏิกิริยาทำงานได้ไม่เต็มประสิทธิภาพ แต่สามารถที่จะกำจัด coke หรือฟื้นฟูประสิทธิภาพการทำงานได้โดยการนำไปรีเจนเนอเรต (regenerate) โดยใช้ความร้อน

3. Vapor transport เป็นการที่มีโมเลกุลมาทำปฏิกิริยากับตัวองค์ประกอบกัมมันต์บนตัวเร่งปฏิกิริยาแล้วเกิดเป็นสารประกอบเชิงซ้อน ซึ่งมีความดันไอสูงหรือสามารถเกิดการระเหยกลายเป็นไอได้ง่าย ทำให้พื้นที่ผิวลดลงและส่งผลต่อการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา

4. Sintering เกิดขึ้นที่อุณหภูมิสูง ประมาณ 700-800 องศาเซลเซียสขึ้นไป โดยปกติโมเลกุลมีการเคลื่อนที่ตลอดเวลา ที่อุณหภูมิสูงขึ้นก็จะมี การเคลื่อนที่มากขึ้น จึงทำให้เกิดการเลื่อนของโลหะอะตอมที่เป็นตัวเร่งในการเกิดปฏิกิริยามารวมตัวกันเป็นกลุ่มก้อนที่ใหญ่ขึ้น ซึ่งทำให้พื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยาก็จะลดลงเช่นเดียวกัน

แบบจำลอง Pseudo-Homogeneous

ภายในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่นมีส่วนประกอบหลักอยู่ 2 ส่วนคือ ตัวเร่งปฏิกิริยาและโมเลกุลของสารที่เคลื่อนผ่านอัดแน่นออกไป แบบจำลองคณิตศาสตร์แบบ Pseudo-homogeneous เป็นแบบจำลองอย่างง่ายของปฏิกรณ์แบบอัดแน่นที่พิจารณาองค์ประกอบทั้งสองส่วนเสมือนเป็นหนึ่งเดียวกัน สำหรับแบบจำลอง 1 มิติ แสดงดังสมการที่ 2.1

สมการ 2.1 แบบ 1 มิติ

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial \tau} &= -f + Pe_1^{-1} \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x_1}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x_2}{\partial \tau} &= \left(bf + Pe_2^{-1} \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi} \right) Le^{-1} \\ \frac{\partial a}{\partial \tau} &= -Da_D x_1 e^{\left(\gamma_D - \frac{\gamma_D}{x_2} \right)} \\ x_1 &= \frac{C}{C_0}, x_2 = \frac{T}{T_0}, \gamma = -\frac{E}{RT_0}, \gamma_D = -\frac{E_D}{RT_0}, Da = \frac{l}{u} Ae^{-\frac{E}{RT_0}}, Le = \frac{\varepsilon \rho_g C_{pg} + (1 - \varepsilon) \rho_s C_{ps}}{\varepsilon \rho_g C_{pg}} \\ b &= \frac{-\Delta H \cdot C_0}{\rho_g C_{pg}}, Pe_1 = \frac{ul}{D_z}, Pe_2 = \frac{\rho_g C_{pg} ul}{k}, \tau = \frac{tu}{el}, \xi = \frac{z}{l} \\ \text{ที่: } f &= x_1 Da \cdot \exp \left[\gamma \left(1 - \frac{1}{x_2} \right) \right] \\ \left(x_j - Pe_j^{-1} \frac{\partial x_j}{\partial \xi} \right) \Big|_{\xi=0} &= x_{j0} \\ \frac{\partial x_j}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} &= 0, j = 1, 2 \\ \text{เงื่อนไขเริ่มต้น } x_1, x_2 &= 1 \end{aligned}$$

หากมิติของปฏิกรณ์ส่งผลให้มีการถ่ายโอนมวลสารและความร้อนในแนวรัศมีของปฏิกรณ์แบบจำลอง Pseudo-homogeneous ของปฏิกรณ์แบบอัดแน่น จำเป็นต้องเพิ่มตัวแปรอิสระเข้าไปคือระยะทางรัศมีหน่วยในแนวรัศมี แสดงดังสมการที่ 2.2

สมการ 2.2 แบบ 2 มิติ

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_1}{\partial \tau} &= -f + Pe_{1a}^{-1} \frac{\partial^2 x_1}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x_1}{\partial \xi} + Pe_{1r}^{-1} \left(\frac{\partial^2 x_1}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial x_1}{\partial \eta} \right) \\ \frac{\partial x_2}{\partial \tau} &= \left(bf + Pe_{2a}^{-1} \frac{\partial^2 x_2}{\partial \xi^2} - \frac{\partial x_2}{\partial \xi} + Pe_{2r}^{-1} \left(\frac{\partial^2 x_2}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{\partial x_2}{\partial \eta} \right) \right) Le^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{ที่:} \quad \eta &= r/R_t & Pe_{1r} &= \frac{uL}{D_r} \left(\frac{R_t}{L} \right)^2 \\ Pe_{2r} &= \frac{\rho_s c_s uL}{\lambda_r} \left(\frac{R_t}{L} \right)^2 \end{aligned}$$

แบบจำลอง วิวิธภักดิ์

แนวคิดของแบบจำลองนี้คือการพิจารณาการแลกเปลี่ยนมวลระหว่างที่ผิวสัมผัสของสถานะของไหลกับสถานะของแข็ง ซึ่งจะต่างจากแบบจำลอง Pseudo-Homogeneous เพราะว่าเป็นแบบจำลอง Pseudo-Homogeneous นั้นมองเป็นเนื้อเดียวกันเลยเสมือนว่ามีอยู่แค่สถานะเดียวไม่มีการแพร่ผ่านไปยังอีกสถานะอื่น

แบบจำลองวิวิธภักดิ์ สำหรับเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial z} + D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + D_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} \right) - k_f a_v (C - C^*)$$

$$C_p \rho_s \frac{\partial T}{\partial t} = -u C_p \rho_s \frac{\partial T}{\partial z} + \lambda_{ax} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \lambda_r \left(\frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} \right) - h a_v (T - T^*)$$

$$\text{เงื่อนไขขอบเขต:} \quad \text{all } z, r = 0: \quad \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

$$\text{all } z, r = R: \quad \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=R} = 0, \quad -\lambda_r \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_{r=R} = h_{\text{wall}} (T_{r=R} - T_{\text{wall}})$$

$$\text{all } r, z = 0: \quad (uC)_{z=0-} = (uC)_{z=0+} - D_{ax} \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{z=0+}$$

$$(uC)_{z=0-} = (uC)_{z=0+} - D_{ax} \left(\frac{\partial C}{\partial z} \right)_{z=0+}$$

$$\text{all } r, z = L \quad \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial T}{\partial z} = 0$$

$$\text{เงื่อนไขเริ่มต้น:} \quad 0 \leq z \leq L, 0 \leq r \leq R \quad C = C^* = (C)_{\text{initial}}, T = T^* = (T)_{\text{initial}}$$

ในงานวิจัยนี้ ได้ใช้แบบจำลอง Pseudo-Homogeneous หรือ single phase แบบ 1 มิติ ปฏิกริยาเคมีที่ใช้เป็นแบบคายความร้อน อันดับปฏิกริยา อันดับ 1 เนื่องมาจากการใช้แบบจำลอง วิวิธภักดิ์ (Heterogeneous) ในการทดลองแบบจำลองให้ผลจากการถ่ายเทไม่แตกต่างกันกับแบบจำลอง Pseudo-Homogeneous ในกรณีที่ระบบมีสถานะคงตัวที่ตำแหน่งเดียวซึ่งการใช้แบบจำลองวิวิธภักดิ์การคำนวณนั้นยุ่งยากและซับซ้อนกว่ากันมาก

อุปกรณ์และวิธีการ

ในงานวิจัยนี้ ประกอบด้วยขั้นตอนการทดลองต่าง ๆ โดยมีวัตถุประสงค์หลักเพื่อศึกษาผลกระทบที่มีต่อการเปลี่ยนแปลงทางความร้อนภายในเครื่องปฏิกรณ์ ที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบจับปล้นและการเสื่อมสภาพแบบปกติ ที่มีผลความเข้มข้นและอุณหภูมิของสารตั้งต้น เพื่อหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้ในการทำนายค่าความถี่ธรรมชาติของระบบ กรณีในการเกิดปรากฏการณ์พุ่งขึ้นของอุณหภูมิ โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ Pseudo-homogeneous ปฏิกิริยาเคมีในเครื่องปฏิกรณ์เป็นแบบคายความร้อนและเป็นปฏิกิริยาอันดับ 1 โดยใช้เครื่องคอมพิวเตอร์บุคคลและโปรแกรม Flex PDE จำลองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้นในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น

อุปกรณ์

1. ชุดเครื่องคอมพิวเตอร์บุคคล (Pentium 4[®] CPU 2.80 GHz)
2. โปรแกรมระบบปฏิบัติการ Window XP
3. โปรแกรมจำลองเหตุการณ์ Flex PDE
4. โปรแกรม Excel
5. โปรแกรมการคำนวณ STATISTICA
6. โปรแกรมการคำนวณ Poly Math

ตัวแปรที่ทำการศึกษา

1. ค่าพลังงานการกระตุ้น (γ, γ_D)
2. Damkohler number (Da, Da_D)
3. Peclet number (Pe_1, Pe_2)
4. Lewis number (Le)
5. Adiabatic temperature (b)
6. ความถี่ (frequency)

วิธีการ

ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ Pseudo-homogeneous ปฏิกิริยาอันดับ 1 และเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน เมื่อเริ่มการทดลองรอจนกระทั่งเวลาไร้หน่วยเป็น 30000 เพื่อให้แน่ใจว่าระบบเข้าสู่สภาวะคงตัวแล้วจึงเริ่มให้มีการเชื่อมสภาพหรือรบกวนอุณหภูมิของสารป้อนที่เข้า

1. การวิเคราะห์หาปัจจัยที่มีผลต่อประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา

- 1.1 ศึกษาวิธีการใช้โปรแกรม Flex PDE และหาข้อมูลแบบจำลองทางคณิตศาสตร์
- 1.2 แปลงแบบจำลองเป็นภาษาคอมพิวเตอร์ที่ใช้กับ โปรแกรม Flex PDE
- 1.3 ทำการเปลี่ยนค่าของตัวแปรต่าง ๆ ที่อยู่ในสมการแบบจำลองทางคณิตศาสตร์
- 1.4 ทำการเปลี่ยนค่าพลังงานกระตุ้นของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) 0, 2, 5, 8, 10,13, 15 และ 17 ตามลำดับ ($Da_D = 4 \cdot 10^{-6}$, $\gamma = 15$, $Da = 0.4$, $b = 0.35$, $Pe_1 = 300$, $Pe_2 = 40$, $Le = 2000$)
- 1.5 ทำการเปลี่ยนเฉพาะค่า $\gamma_D = 15$ และ $Da_D = 2 \cdot 10^{-6}$, $4 \cdot 10^{-6}$ และ $6 \cdot 10^{-6}$
- 1.6 ทำการเปลี่ยนค่า $\gamma_D = 5.5$ และ $Da_D = 0.004$
- 1.7 ทำการเปลี่ยนค่า $Da = 0.7$, $Da_D = 4 \cdot 10^{-7}$, $\gamma_D = 18$ และ ความถี่ = 0.0016
- 1.8 ทำการเปลี่ยนค่า $\gamma_D = 12, 15, 18$ และ ความถี่ = 0.0004, 0.0008, 0.0010, 0.0012, 0.0016, 0.0020, 0.0030, 0.0040 และ 0.0050
- 1.9 เก็บผลการทดลอง

2. การวิเคราะห์หาความถี่ธรรมชาติของระบบ

- 2.1 สุ่มค่าตัวแปรต่าง ๆ เพื่อจำลองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้น (Pe_1 , Pe_2 , b , Da , Le , γ , Da_D และ γ_D) แสดงในตารางที่ ข.1
- 2.2 ทำการเปลี่ยนค่าความถี่ = 0.0004, 0.0008, 0.0010, 0.0012, 0.0016, 0.0020, 0.0030, 0.0040 และ 0.0050
- 2.3 จำลองสถานการณ์จนถึงเวลาไร้หน่วย (τ) 100,000
- 2.4 เก็บผลการทดลองและนำมาคำนวณ
- 2.5 เลือกค่าอุณหภูมิที่สูงสุดภายในเครื่องปฏิกรณ์ ของช่วงเริ่มสภาวะคงตัว 1 ค่าและหลังที่มีการเปลี่ยนแปลงอีก 1 ค่า โดยใช้โปรแกรมการคำนวณ Excel

2.6 นำค่าอุณหภูมิที่ได้มาคำนวณหาค่า Gain Factor (รายละเอียดในภาคผนวก ข 1)

$$\text{Gain Factor} = \frac{(T_{\max, \text{transient}} - T_{\max, \text{initial steady state}})}{\text{step size of the inlet temperature}}$$

2.7 นำค่า Gain Factor มาวาดกราฟกับความถี่ ตามแสดงในภาพที่ 4.8

3. การวิเคราะห์หาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อคำนวณความถี่ธรรมชาติของระบบ

3.1 สุ่มค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อจำลองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้น (Pe_1 (200-700), Pe_2 (40-150), b (0.3-0.5), Da (0.2-0.7), Le (500-5000) และ γ (9-25)) ทั้งหมด 30 ตัวอย่าง แสดงในตารางที่ ข.2

3.2 ทำการเปลี่ยนค่าความถี่ = 0.0004, 0.0008, 0.0010, 0.0012, 0.0016, 0.0020, 0.0030, 0.0040 และ 0.0050 ในแต่ละตัวอย่าง

3.3 จำลองสถานการณ์จนถึงเวลาไร้หน่วย (τ) 100,000

3.4 เก็บผลการทดลองที่ได้และนำมาคำนวณทางสถิติโดยโปรแกรมการคำนวณ STATISTICA 7 (ตามรายละเอียดในภาคผนวก ก 3)

3.5 นำข้อมูลมาพัฒนาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ในรูปแบบ power law

$$\text{Resonance frequency} = a\gamma^b Le^c Pe_1^d Pe_2^e Da^f b^g$$

3.6 นำแบบจำลองที่ได้จากการคำนวณไปทดสอบกับเงื่อนไขต่าง ๆ เพื่อนำค่าที่ได้จากการทดลองเทียบกับค่าที่ได้จากการคำนวณ แสดงในตารางที่ ข 4

4. การวิเคราะห์หาเกณฑ์ในการเกิดปรากฏการณ์พุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (overshoot temperature)

4.1 กำหนดค่าตัวแปรคงที่ $Le = 2000$, $b = 0.35$, $Pe_1 = 300$, $Pe_2 = 40$ สุ่มค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อจำลองเหตุการณ์ที่เกิดขึ้น (γ (9-25), γ_D (5.5-25), Da (0.2-0.7) และ Da_D (10^{-3} - 10^{-8}) ทั้งหมด 70 ตัวอย่าง แสดงในตารางที่ ข.8

4.2 จำลองสถานการณ์จนถึงเวลาไร้หน่วย (τ) 100,000

4.3 เก็บผลการทดลองที่ได้

4.4 หาค่าสูงสุดของอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ (maximum temperature) ของแต่ละเงื่อนไข

4.5 วิเคราะห์หาความสัมพันธ์ของผลการทดลอง

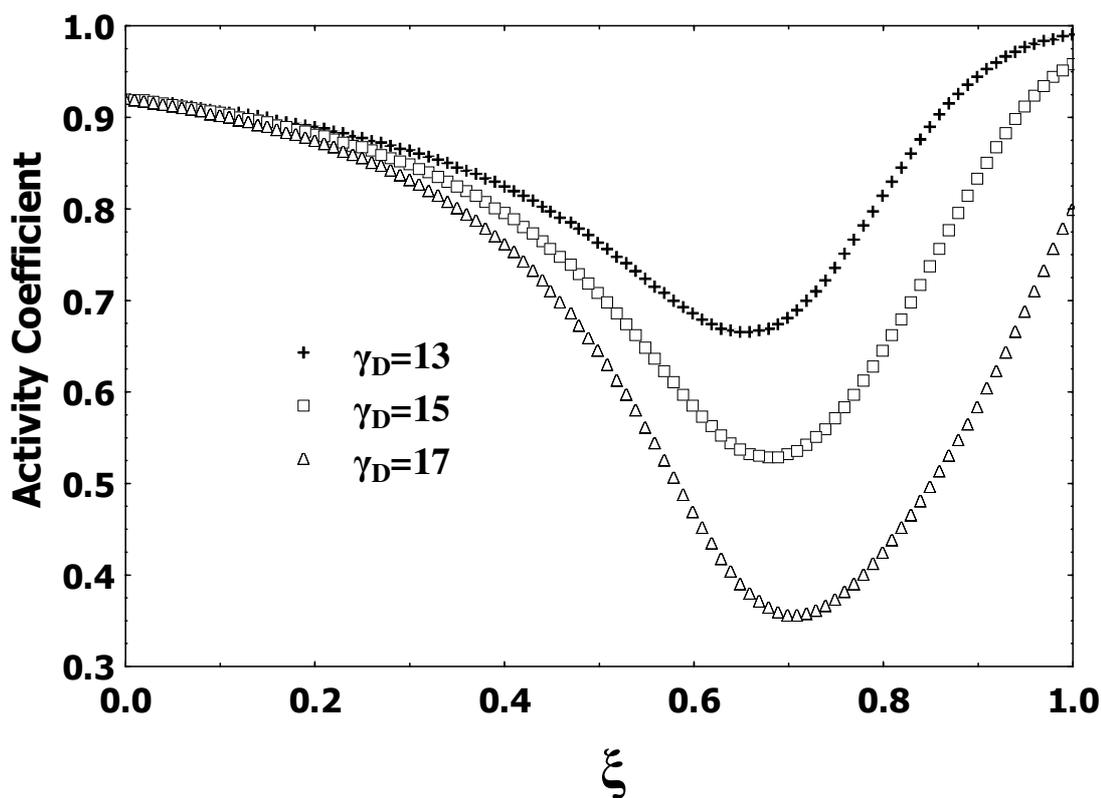
หมายเหตุ ในการพิจารณาปรากฏการณ์อุณหภูมิกายในปฏิกรณ์ฟุ้งขึ้นผลนิยามว่าอุณหภูมิที่ตำแหน่งสูงสุดฟุ้งขึ้นมากกว่าร้อยละ 5 ของอุณหภูมิสูงสุดที่สภาวะคงตัวก่อนมีการเสื่อมสภาพหรือการรบกวน

ผลและวิจารณ์

จากการศึกษาผลกระทบที่มีต่อการเปลี่ยนแปลงทางความร้อนภายในเครื่องปฏิกรณ์ ที่มีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบจับปล้นและการเชื่อมสภาพแบบปกติ ด้วยวิธีการจำลองเหตุการณ์ด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ pseudo-homogeneous ปฏิกริยาอันดับ 1 และเป็นปฏิกริยาคายความร้อนมีตัวแปรที่สำคัญ Pe_1 , Pe_2 , γ , Da , b , Le , Da_D และ γ_D โดยกำหนดให้ยังไม่มี การเชื่อมสภาพเพื่อให้ระบบเข้าสู่สภาวะคงตัวและความเข้มข้นของสารป้อนต้องเหลือ 0 ก่อนออกจากเครื่องปฏิกรณ์ จนกระทั่งแน่ใจว่าระบบเข้าสู่สภาวะดังกล่าวจึงเริ่มมีการเชื่อมสภาพ โดยมีวัตถุประสงค์หลักเพื่อศึกษาปัจจัยที่มีผลต่อการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา อันได้แก่ อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ และความเข้มข้นของสารตั้งต้น ศึกษาปรากฏการณ์พุ่งขึ้นของอุณหภูมิ ศึกษาปรากฏการณ์การขยายที่ทำให้เกิดการกำทอนด้วยการรบกวนอุณหภูมิของสารป้อนที่ทางเข้าด้วยความถี่ต่างๆ เมื่อมีการเชื่อมสภาพตัวเร่งปฏิกิริยาและหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้ในการทำนายค่าความถี่ธรรมชาติของระบบ ผลการทดลองและการวิเคราะห์ผลสามารถแสดงและอธิบายได้ดังนี้

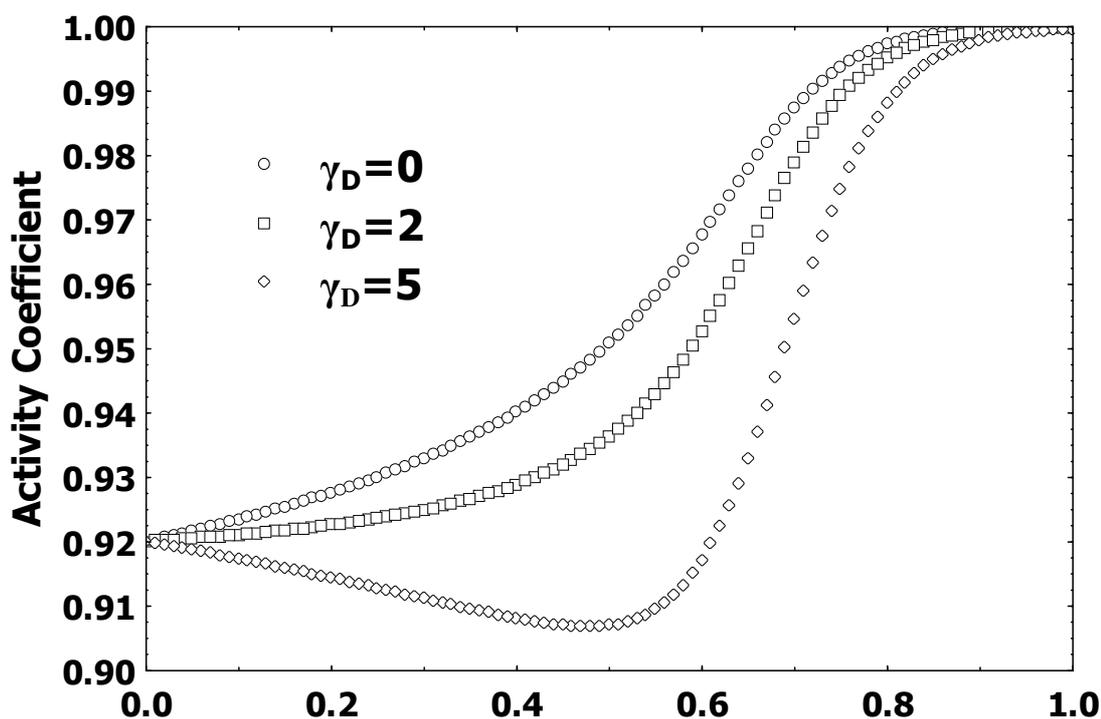
ผลการทดลอง

ในส่วนแรกของการจำลองการทำงานของปฏิกรณ์แบบอัดแน่น เป็นการศึกษาผลของปัจจัยสำหรับการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ที่มีต่อความว่องไวของตัวเร่งปฏิกิริยาในแต่ละส่วนตามความยาวของปฏิกรณ์ กำหนดค่าในแบบจำลอง $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$ และ $Da_D = 4 * 10^{-6}$ ให้มีค่าคงที่ แล้วทำการเปลี่ยนค่าพลังงานกระตุ้นของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา $\gamma_D = 13, 15$ และ 17 โดยปฏิกริยายังไม่มีการเชื่อมสภาพตั้งแต่เริ่มต้น เพื่อให้ระบบเข้าสู่สมดุล ความเข้มข้นไร้หน่วยก่อนทางออกต้องลดลงเท่ากับ 0 จนกระทั่งเวลาไร้หน่วย 0 จึงได้ให้มีการเริ่มเชื่อมสภาพ แล้วนำค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาไร้หน่วย η ที่เวลาไร้หน่วย 20000 มาแสดงความสัมพันธ์กับระยะแกนไร้หน่วย แสดงในภาพ 3



ภาพที่ 3 ค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่ได้รับผลกระทบจาก พลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) ที่เปลี่ยนไปตามแนวแกนของปฏิกรณ์โดยที่ค่าคงที่ $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $Da_D = 4 * 10^{-6}$

จากภาพที่ 3 จะเห็นว่ากราฟทั้ง 3 เส้นมีการโค้งที่ไม่เท่ากัน โดยกราฟที่มีค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพมากที่สุดจะมีการโค้งมากที่สุด โดยที่กราฟทั้ง 3 เส้นมีลักษณะคล้ายกัน คือมีการเสื่อมสภาพมากที่สุด (สังเกตจากการลดลงของค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวของตัวเร่งปฏิกิริยา) อยู่ประมาณช่วง 0.7 ของระยะแกนไร้หน่วย ซึ่งบริเวณนั้นคือบริเวณที่เกิดปฏิกิริยาสมบูรณ์ และเมื่อพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) ค่ามากขึ้นมีผลทำให้ตัวเร่งปฏิกิริยาเสื่อมสภาพเร็วขึ้น โดยจุดที่เสื่อมสภาพมากที่สุด ก่อนข้างไปทางข้างท้ายของเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น เพราะค่าพลังงานกระตุ้นของปฏิกิริยามีค่ามาก ทำให้ปฏิกิริยาเกิดได้เร็ว และปฏิกิริยานี้เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน ซึ่งพลังงานความร้อนที่คายออกมาจะยิ่งไปกระตุ้นให้เกิดปฏิกิริยาได้เร็วยิ่งขึ้น ทำให้สัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา มีค่าลดลงอย่างรวดเร็ว

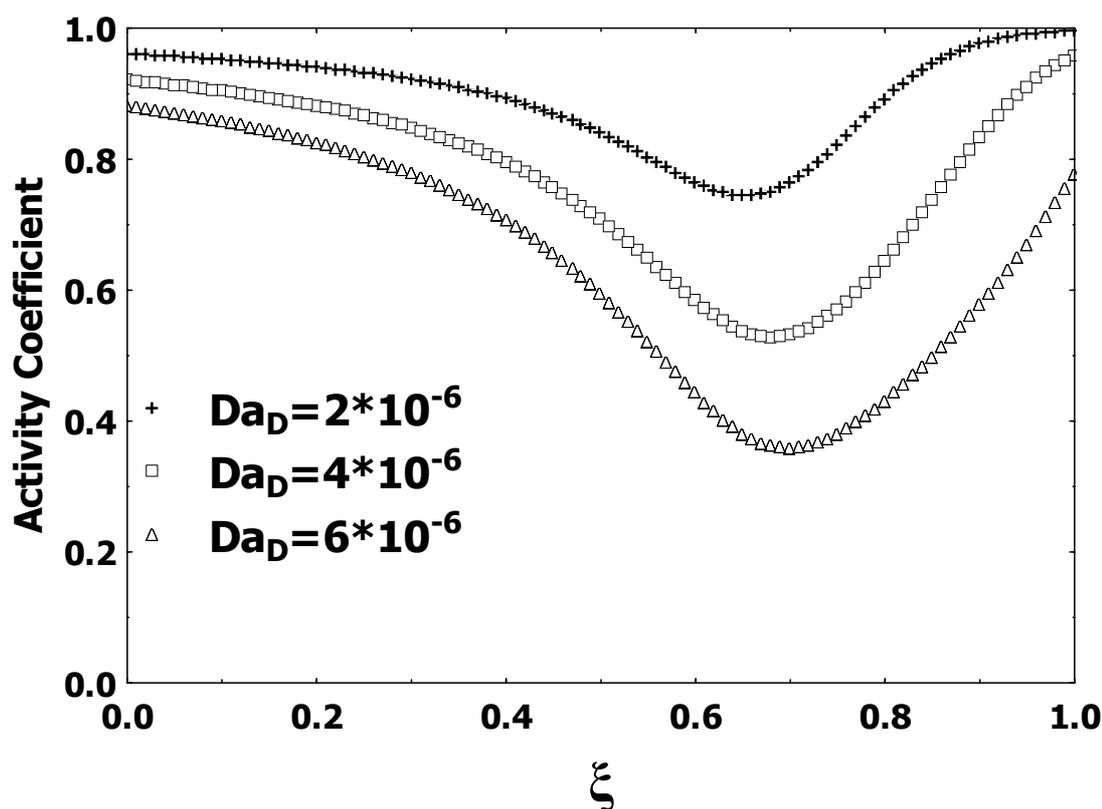


ภาพที่ 4 ค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่ได้รับผลกระทบจาก พลังงานการกระตุ้นของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) ที่เปลี่ยนไปตามแนวแกนของปฏิกรณ์โดยที่ค่าคงที่ $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $Da_D = 4 * 10^{-6}$

กราฟทั้ง 3 เส้นที่ได้มีลักษณะคล้ายกัน จุดที่มีค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวต่ำสุดอยู่ที่ด้านหน้าของเครื่องปฏิกรณ์ ซึ่งจะแตกต่างกับในกรณีของภาพที่ 4 ยิ่งค่าพลังงานกระตุ้นของการเชื่อมสภาพมีค่าน้อย จุดที่มีการเชื่อมสภาพมากที่สุดจะไปอยู่ทางด้านหน้าของเครื่องปฏิกรณ์ ในกรณีที่พลังงานกระตุ้นของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_2) มีค่าเป็นศูนย์ทำให้อัตราการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้นเพียงอย่างเดียว ถ้าค่าพลังงานกระตุ้นของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_2) มีค่าลดลงจะทำให้จุดที่มีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยามากที่สุดจะอยู่ใกล้ทางเข้ามากยิ่งขึ้นดังภาพที่ 4 เป็นผลเนื่องมาจากการขึ้นอยู่กับค่าความเข้มข้นของสารตั้งต้นเพียงอย่างเดียว ซึ่งที่ทางเข้ามีค่าความเข้มข้นมากและน้อยลงเมื่อถูกใช้ไปในปฏิกิริยา

Da_D (Damkohler number) สำหรับการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ก็เป็นปัจจัยอีกตัวที่มีผลต่ออัตราการเชื่อมสภาพโดยตรงจึงได้ออกแบบการทดลอง กำหนดค่าในแบบจำลอง $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$ และ $\gamma_D = 15$ ให้มีค่าคงที่ แล้วทำการเปลี่ยนค่า $Da_D = 2$

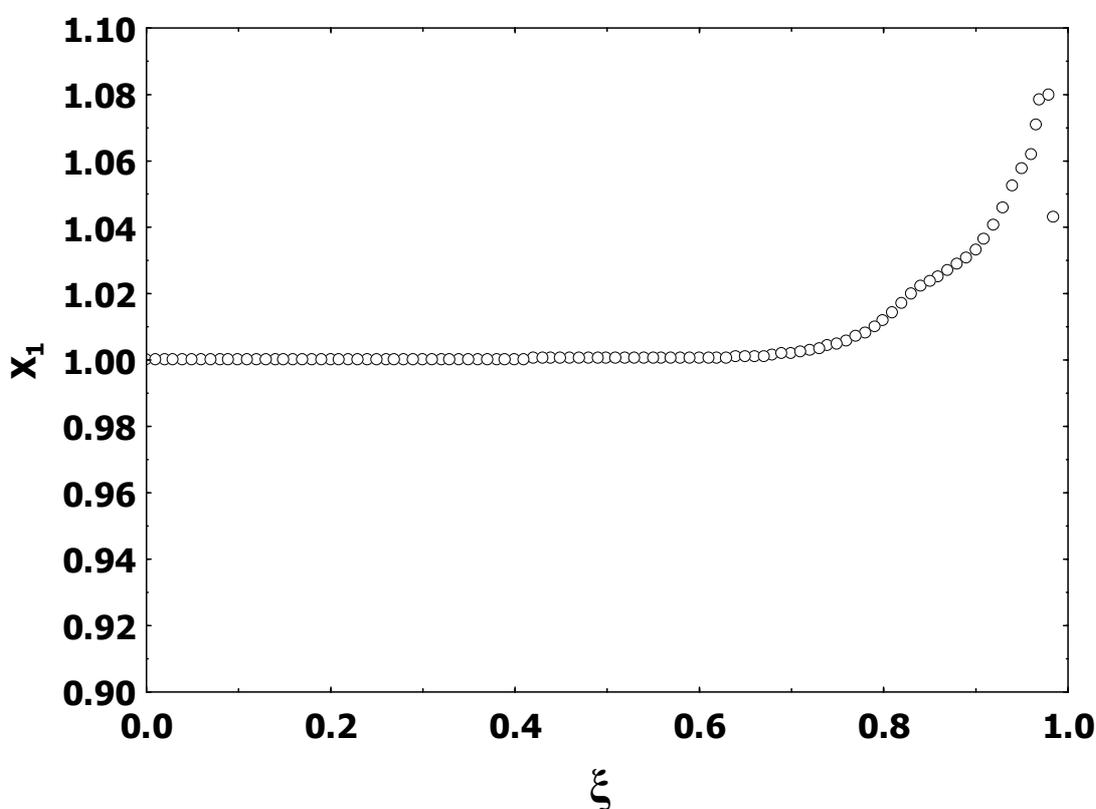
10^{-6} , $4 \cdot 10^{-6}$ และ $6 \cdot 10^{-6}$ โดยปฏิกิริยายังไม่มีการเชื่อมสภาพตั้งแต่เริ่มต้น เพื่อให้ระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว ความเข้มข้นไร้หน่วยก่อนทางออกต้องลดลงมีค่าเท่ากับ 0 จนกระทั่งเวลาไร้หน่วย 0 จึงได้ให้มีการเริ่มเชื่อมสภาพ แล้วนำค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาไร้หน่วย ณ เวลาไร้หน่วย 10000 มาแสดงความสัมพันธ์กับระยะแกนไร้หน่วย ดังแสดงภาพที่ 5



ภาพที่ 5 ค่าพลังงานการกระตุ้นของปฏิกิริยาหลักที่ได้รับผลกระทบจาก Da_D ที่เปลี่ยนไปโดยที่ค่า $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$ และค่าพลังงานการกระตุ้นของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) = 15

จากภาพที่ 5 กราฟทั้ง 3 มีลักษณะคล้ายกัน คือมีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาบริเวณส่วนกลางของปฏิกรณ์มาก โดยส่วนที่มีค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาค่าที่สุด อยู่ประมาณ $\xi = 0.7$ กราฟทั้งสามเส้นไม่มีส่วนทับกันเลย และกราฟเส้นที่มีค่า Da_D มากที่สุดจะอยู่ล่างสุดหรือมีค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาเฉลี่ยน้อยสุด ซึ่งแสดงว่า Da_D เป็นอีกปัจจัยที่มีผลต่ออัตราการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา โดยที่ Da_D มากขึ้นทำให้ปฏิกิริยาหลักเกิดได้ดีขึ้นและปฏิกิริยานี้เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน ความร้อนที่ได้จากการทำปฏิกิริยาไปกระตุ้นทำให้เกิดปฏิกิริยาได้มากยิ่งขึ้น ส่งผลให้ค่าสัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาตกลงเร็วกว่า

จากผลการทดลองที่ผ่านมา จะเห็นได้ว่าบางสภาวะของการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา มีการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิอย่างรวดเร็ว จึงได้ออกแบบการทดลองเพื่อจะหาสาเหตุของปรากฏการณ์นี้ โดยใช้โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ pseudo-homogeneous ปฏิกิริยาอันดับ 1 และเป็นปฏิกิริยาคายความร้อน กำหนดค่าในแบบจำลอง $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $Da_D=18$ และ $\gamma_D=5.5$ ในตอนที่เริ่มการทดลองยังไม่มีมีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา รอจนกว่าระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว ความเข้มข้นไร้หน่วยก่อนทางออกต้องลดลงมีค่าเท่ากับ 0 เวลาไร้หน่วยที่ 0 เริ่มมีการเชื่อมสภาพจนกระทั่งเวลาไร้หน่วย 300 นำข้อมูลที่ได้มาวาดกราฟความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นไร้หน่วย (X_1) กับระยะตามแนวแกนไร้หน่วย (ξ)

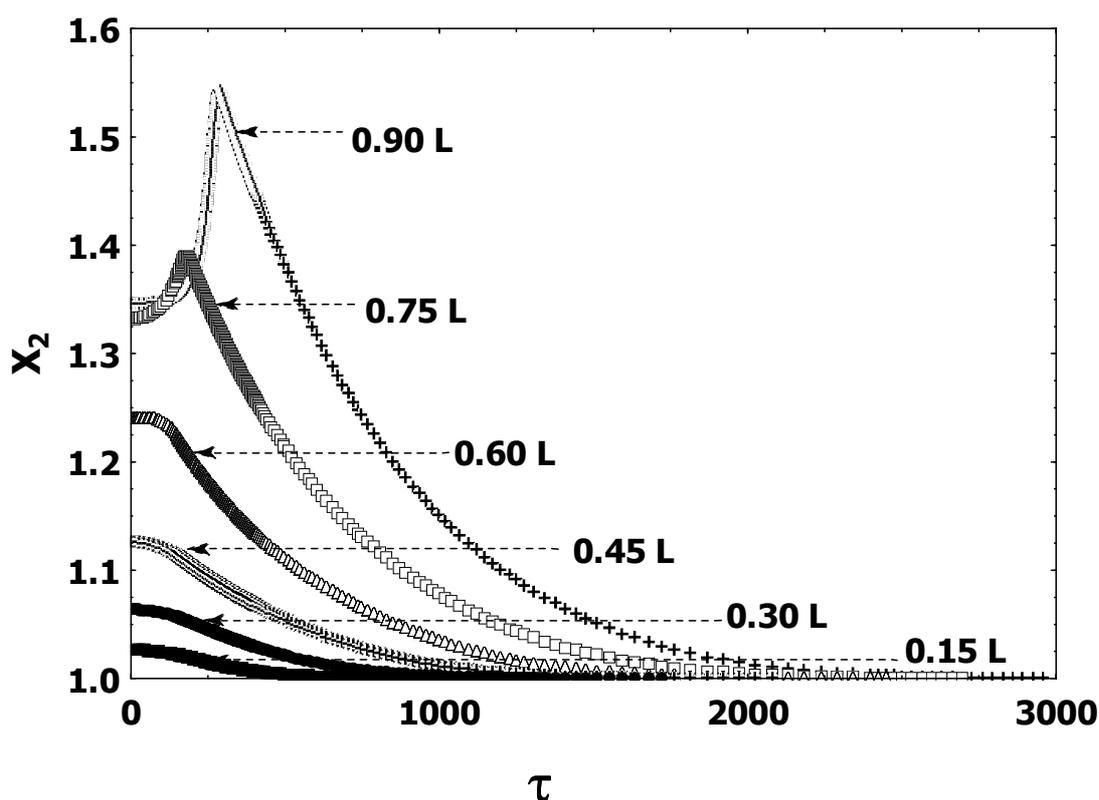


ภาพที่ 6 ความเข้มข้นของสารภายในเครื่องปฏิกรณ์ที่ตำแหน่งต่าง ๆ ($Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $\gamma_D=5.5$ และ $Da_D=18$)

กราฟที่ได้จะมีค่าความเข้มข้นไร้หน่วย เท่ากับ 1 จนเข้าสู่ช่วงท้ายของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าเกินกว่า 1 ซึ่งค่าที่มากที่สุดจากกราฟคือ 1.08 โดยประมาณ การเชื่อมสภาพอย่างรวดเร็วของตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสาเหตุที่ทำให้เกิดการพุ่งขึ้นอย่างรวดเร็วของอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ทั้งนี้เนื่องจากการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาสามารถเหนี่ยวนำให้เกิดคลื่นของความเข้มข้นที่เคลื่อนที่ผ่านปฏิกรณ์ด้วยความเร็วสูง

ซึ่งจากภาพที่ 6 จะสังเกตได้ว่า ความเข้มข้นของสารตั้งต้นมีค่าเกิน 1 เป็นผลเนื่องมาจากที่ในช่วงตอนต้นของเครื่องปฏิกรณ์มีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาอย่างรวดเร็ว ทำให้อัตราการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาภายในเครื่องปฏิกรณ์แตกต่างกันตามระยะในแนวแกนของปฏิกรณ์ ทำให้อัตราการใช้ไปของสารตั้งต้นต่างกัน สารตั้งต้นที่จากเดิมจะถูกใช้ไปในปฏิกิริยาทางเคมีได้ไหลผ่านไปยังช่วงหลังของเครื่องปฏิกรณ์ จึงทำให้ปริมาณของสารตั้งต้นในช่วงถัดไปมีค่ามากขึ้น ดังรูปและมีผลทำให้มีการพุ่งขึ้นสูงของอุณหภูมิอย่างรวดเร็ว

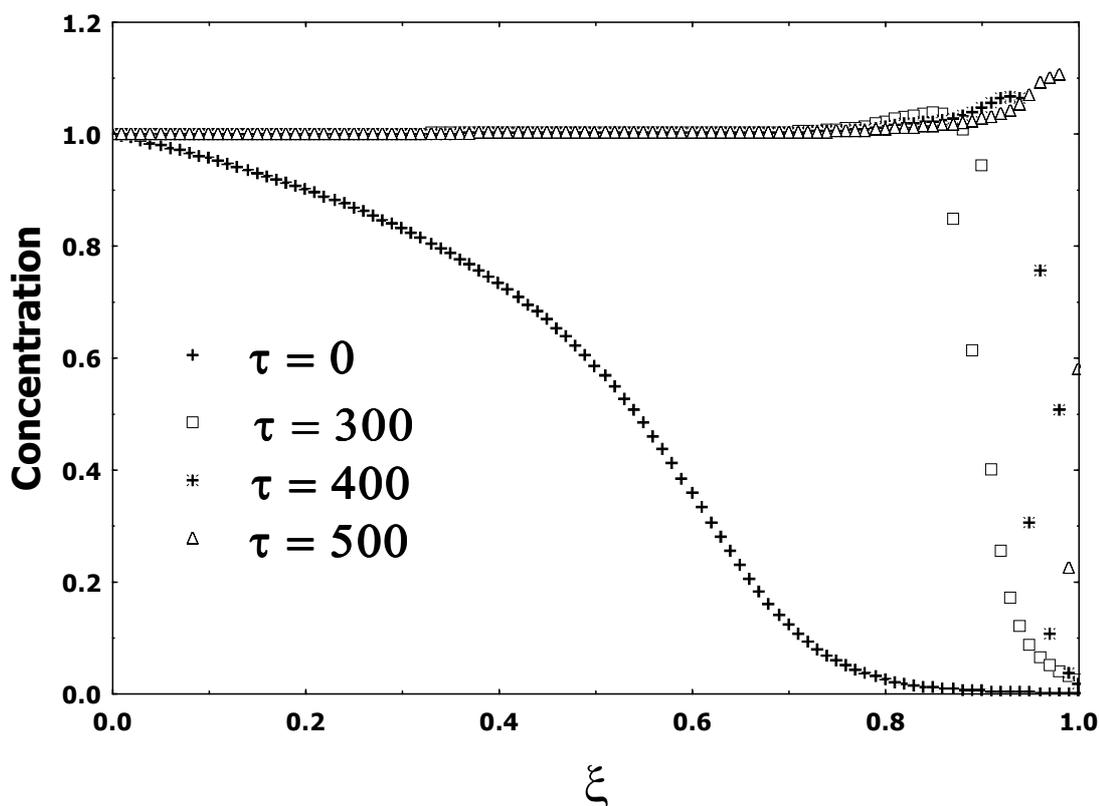
อุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็นสิ่งที่ควรคำนึงถึง เพื่อไม่ให้เกิดอันตรายที่อาจจะเกิดขึ้นได้ จึงได้มีการศึกษาอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ที่ตำแหน่งต่างๆ ในตอนแรกที่เริ่มการทดลองยังไม่มีมีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา รอจนกว่าระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว ความเข้มข้นไร้หน่วยก่อนทางออกต้องลดลงมีค่าเท่ากับ 0 เวลาไร้หน่วยที่ 0 เริ่มมีการเชื่อมสภาพ นำข้อมูลที่ได้มาวาดกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิไร้หน่วย (X_2) กับเวลาไร้หน่วย (τ)



ภาพที่ 7 อุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ ภายในปฏิกรณ์ ($Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $\gamma_D=4$ และ $Da_D=0.004$)

การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิไร้หน่วยภายในเครื่องปฏิกรณ์ที่ตำแหน่งต่างๆ โดยจากภาพที่ 7 ตอนต้นปฏิกิริยาอยู่ในสภาวะคงตัวและเริ่มมีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เวลาไร้หน่วย 0 ในรูปข้างบนมีกราฟทั้งหมด 6 เส้น โดยแต่ละเส้นแสดงโครงร่างอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ สังเกตที่ตำแหน่ง 0.15L, 0.30L, 0.45L และ 0.60L มีค่าอุณหภูมิไร้หน่วยสูงสุดที่สภาวะสมดุล (เวลาไร้หน่วยเท่ากับ 0) ไม่เกิน 1.35 ซึ่งแสดงว่าปฏิกิริยาเกิดได้ยังไม่สมบูรณ์โดยปกติค่าอุณหภูมิไร้หน่วยของระบบที่สภาวะสมดุลจะสูงสุดเท่ากับ 1 รวมกับค่า b แต่ในตำแหน่งที่ 0.75L และ 0.90L ณ เวลาไร้หน่วย 200 – 400 โดยประมาณ มีค่าสูงกว่าค่าอุณหภูมิไร้หน่วยสูงสุดที่สภาวะสมดุล (1 รวมกับค่า b) โดยมีค่า 1.4 กับ 1.55 ตามลำดับ เนื่องมาจากมีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาอย่างรวดเร็วทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงอย่างรวดเร็วไปด้วย ส่งผลให้ความเข้มข้นที่ตำแหน่งใกล้เคียงทางออก ไหลไปยังตำแหน่งถัดไปในเครื่องปฏิกรณ์ส่งผลทำให้ค่าความเข้มข้นไร้หน่วยมีค่าเกิน 1 เมื่อความเข้มข้นที่มากขึ้นไหลไปยังช่วงท้ายของปฏิกรณ์ ซึ่งบริเวณนั้นตัวเร่งปฏิกิริยายังมีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา แล้วเกิดปฏิกิริยาได้รุนแรงกว่าปกติที่มีความเข้มข้นไร้หน่วยเท่ากับ 1 และปฏิกิริยานี้เป็นปฏิกิริยาคายความร้อน ความร้อนที่ปฏิกิริยาคายออกมาส่งผลให้เกิดปฏิกิริยาได้รุนแรงยิ่งขึ้น

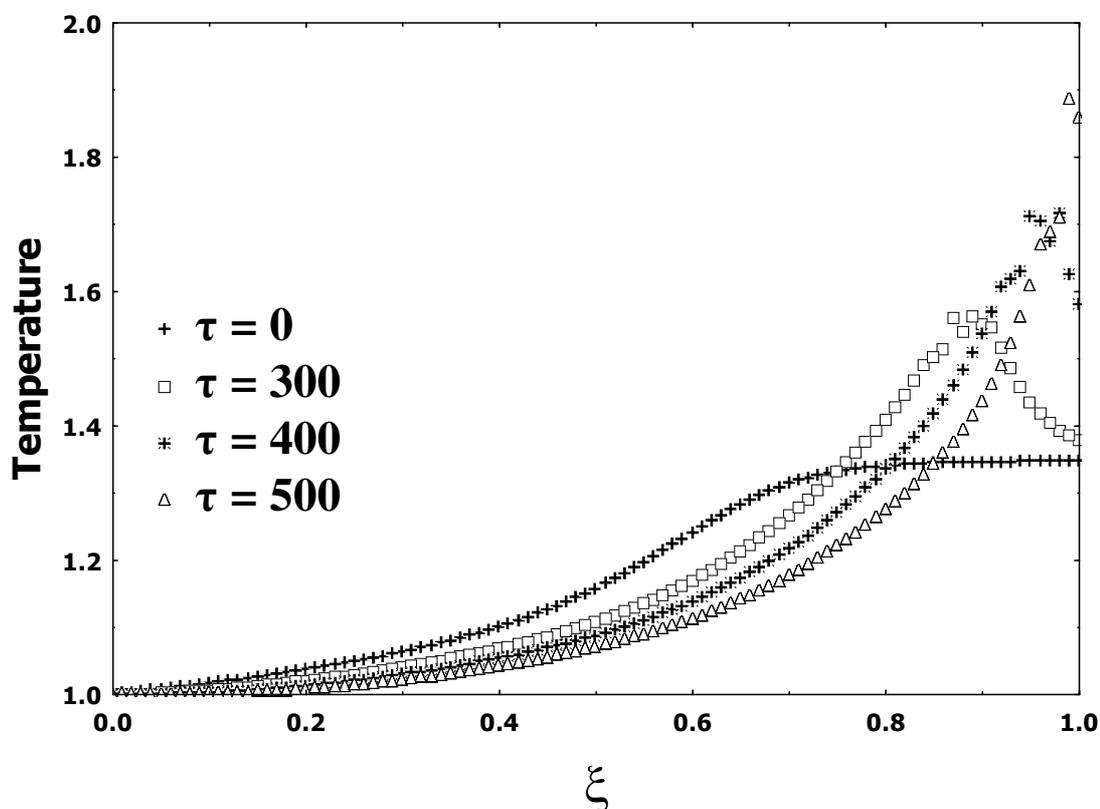
หลังจากการสังเกตความเข้มข้นและอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ แต่เป็นที่ ณ เวลาเดียวกันหมด ซึ่งต้องการจะศึกษาเพิ่มเติมจึงได้ออกแบบการทดลองเพิ่ม เพื่อพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นและอุณหภูมิ ที่เวลาต่างกัน กับระยะตามแนวแกนของเครื่องปฏิกรณ์ กำหนดค่าในแบบจำลอง $Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.4$, $b=0.35$, $Le=2000$, $Da_D = 0.004$ และ $\gamma_D = 5$ ให้มีค่าคงที่ ในตอนแรกที่เริ่มการทดลองยังไม่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา รอจนกว่าระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว ความเข้มข้นไร้หน่วยก่อนทางออกต้องลดลงเท่ากับ 0 เวลาไร้หน่วยที่ 0 เริ่มมีการเสื่อมสภาพจนกระทั่งเวลาไร้หน่วย 300, 400 และ 500 นำข้อมูลที่ได้มาวาดกราฟความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นไร้หน่วย (X_1) กับระยะตามแนวแกนไร้หน่วย (ξ) และความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิไร้หน่วย (X_2) กับระยะตามแนวแกนไร้หน่วย (ξ)



ภาพที่ 8 ความเข้มข้นที่ตำแหน่งต่างๆ ภายในเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น ($\gamma = 15$, $Da = 0.4$, $b = 0.35$, $\gamma_D = 5$ และ $Da_D = 0.004$ และเริ่มมีการเชื่อมสภาพอย่างรวดเร็ว ที่ $\tau = 0$)

ภาพที่ 8 แสดงถึงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในปฏิกรณ์ตามระยะแนวแกนของปฏิกรณ์ที่เวลาต่าง ๆ หลังจากทีระบบเริ่มมีการเชื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาอย่างรวดเร็ว จะมีลักษณะคล้ายกัน ทั้ง 3 ช่วงเวลา (300, 400, 500) มีความเข้มข้นไร้หน่วยเท่ากับขาเข้า คือ 1 จนกระทั่งที่ปลายเครื่องปฏิกรณ์ (0.8-1 ของระยะความยาวไร้หน่วย) จะมีค่ามากกว่า 1 ส่วนกราฟที่เวลาไร้หน่วย 0 กราฟจะเป็นโพรไฟล์ปกติของความเข้มข้นไร้หน่วยในเครื่องปฏิกรณ์ กล่าวคือค่าความเข้มข้นไร้หน่วยมีค่าลดลงเรื่อยๆ จนกระทั่งเป็น 0 ก่อนออกจากเครื่องปฏิกรณ์ จะเห็นได้ว่าเส้นกราฟที่แสดงด้วยสัญลักษณ์รูปสี่เหลี่ยมเป็นกราฟที่แสดงถึง ปริมาณความเข้มข้นของสารเมื่อเทียบกับที่ทางเข้า และในเวลาหลังจากที่เริ่มมีการเชื่อมสภาพอย่างรวดเร็วของตัวเร่งปฏิกิริยา ($\tau = 300$) เส้นกราฟที่แสดงด้วยสัญลักษณ์รูปกากบาท จะเห็นได้ว่าจากเดิมที่มีการใช้ไปของสารตั้งต้นในช่วงกลางเครื่องปฏิกรณ์แบบอัดแน่น แต่เมื่อมีการเชื่อมสภาพอย่างรวดเร็วทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาลดลงเป็นอย่างมาก จึงเป็นผลทำให้ความเข้มข้นของสารตั้งต้นยังคงมีค่าเท่ากับ 1 จนถึงช่วง 0.8 ระยะไร้หน่วยตามแนวแกนของเครื่องปฏิกรณ์ซึ่ง ณ ตำแหน่งนี้ในเวลานั้นยังมีตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีประสิทธิภาพสูงอยู่ จึงมีการลดลงอย่างรวดเร็วของสารตั้งต้นอันเนื่องมาจากการทำปฏิกิริยาทางเคมี ในเวลาต่อมา จุดนี้ก็ไม่สามารถทำปฏิกิริยาได้ดีเท่าเดิม จึงส่งผลให้ความเข้มข้น

ของสารตั้งต้น ไหลไปยังตำแหน่งถัดเข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์ และเกิดปรากฏการณ์เดียวกันต่อไปเรื่อยๆ ไปจนกระทั่งตัวเร่งปฏิกิริยาหมดประสิทธิภาพทั่วทั้งเครื่องปฏิกรณ์

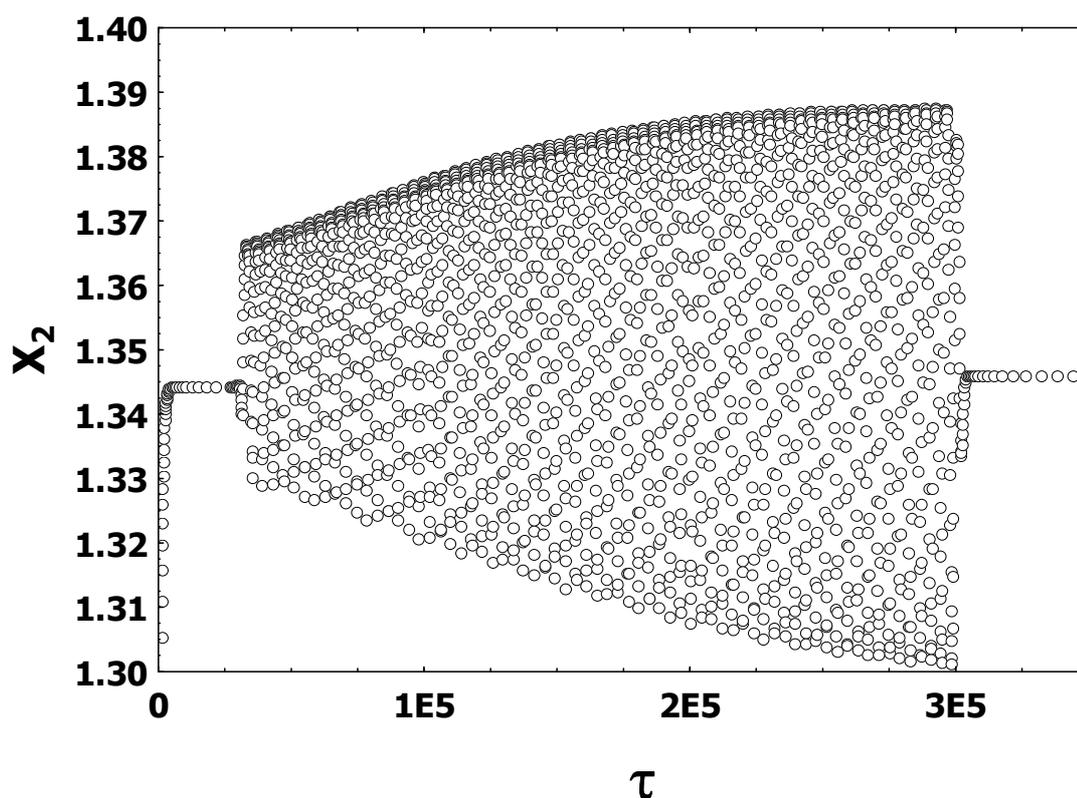


ภาพที่ 9 อุณหภูมิภายในปฏิกรณ์ที่เวลาต่างๆ ($\gamma = 15$, $Da = 0.4$, $b = 0.35$, $\gamma_D = 5$, $Da_D = 0.004$ และเริ่มมีการเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็ว ที่ $\tau = 0$)

โดยกราฟที่ยังไม่มีการเริ่มเสื่อมสภาพ ที่ $\tau = 0$ ลักษณะกราฟจะมีอุณหภูมิไร้หน่วยเริ่มจาก 1 แล้วมากขึ้นจนกระทั่งเข้าสู่สภาวะคงตัว จากภาพที่ 4.5 กราฟที่เวลาไร้หน่วยเท่ากับ 0 ค่าความเข้มข้นไร้หน่วยภายในเครื่องปฏิกรณ์จะค่อยๆ ลดลงเรื่อยๆ เมื่อระยะทางลึกเข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์ จะกระทั่งเหลือ 0 ที่ตำแหน่งประมาณ 0.7 ของระยะไร้หน่วยตามแนวแกน ค่าอุณหภูมิขณะนี้จะอยู่ที่ 1 บวกกับค่า b หรือ 1.35 ซึ่งเป็นอุณหภูมิสูงสุดของระบบตอนยังไม่มี การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา อีก 3 กราฟที่เวลาต่อมา จะมีค่าอุณหภูมิไร้หน่วยน้อยกว่ากราฟที่ยังไม่มีการเสื่อมสภาพ ในบริเวณต้นของปฏิกรณ์ (0-0.7) หลังจากช่วงแรกกราฟทั้ง 3 เส้นจะมีค่าอุณหภูมิไร้หน่วยมากกว่า อุณหภูมิสูงสุดของระบบก่อนที่จะมีการเสื่อมสภาพ แต่กราฟทั้ง 3 เวลาจะมีอุณหภูมิสูงสุด ณ ตำแหน่งที่ต่างกันและค่าสูงสุดของอุณหภูมินั้นไม่เท่ากันด้วย และจากภาพที่ 9 จะเห็นได้ว่า จุดสูงสุดของอุณหภูมิเปลี่ยนไปตามเวลาที่มากขึ้น อันเนื่องมาจากประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ในช่วงแรกนั้นเสื่อมประสิทธิภาพไปหมดแล้วจึงเป็นผลทำให้โมเลกุลของสารตั้งต้นถ่ายทอดมายัง ช่วงถัดไปในเครื่องปฏิกรณ์และทำให้เกิดการเพิ่มความเข้มข้นของสารตั้งต้นจึงส่งผลให้ปฏิกิริยา

เกิดได้ดีในช่วงถัดไปที่ยังไม่มีการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาและสูงขึ้นไปมากขึ้นตามลำดับจนตัวเร่งปฏิกิริยาหมดประสิทธิภาพทั่วเครื่องปฏิกรณ์

ในความเป็นจริงเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้งานไม่สามารถควบคุมอุณหภูมิของสารป้อนให้คงที่ตลอดเวลา ซึ่งผลกระทบของการถูกรบกวนของอุณหภูมิของสารป้อนที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์นั้น เป็นสิ่งที่มีความสำคัญไม่น้อยไปกว่าปัจจัยอื่นๆ ที่ก่อให้เกิดอุบัติเหตุหรือสร้างความเสียหายให้กับอุปกรณ์ต่างๆ หรือผู้ใช้อุปกรณ์นั้น จึงได้ออกแบบการทดลองเพื่อศึกษาผลกระทบเมื่อสารป้อนมีอุณหภูมิแกว่งขึ้น-ลง และพฤติกรรมของอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ว่ามีลักษณะอย่างไร ในตอนแรกที่มีการทดลองยังไม่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา รอจนกว่าระบบเข้าสู่สมดุล ความเข้มข้นไรรุ่นก่อนทางออกต้องลดลงเท่ากับ 0 เวลาไรรุ่นที่ 30000 เริ่มมีการเสื่อมสภาพ พร้อมกับการรบกวนอุณหภูมิ แอมพลิจูด 0.01 ด้วยความถี่ 0.0016 จากนั้นนำค่าอุณหภูมิสูงสุด ณ เวลาต่างๆ มาสร้างกราฟความสัมพันธ์ระหว่าง อุณหภูมิไรรุ่น (X_2) กับเวลาไรรุ่น (τ)



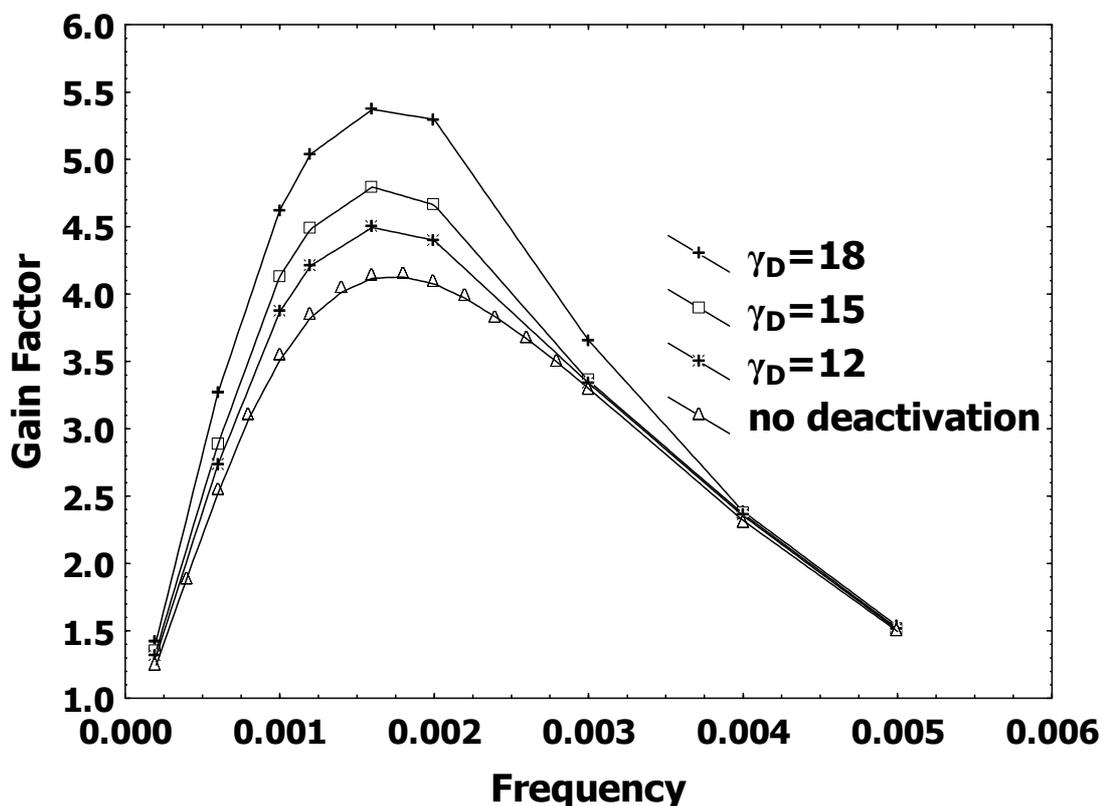
ภาพที่ 10 อุณหภูมิสูงสุดที่เวลาต่างๆ ภายในเครื่องปฏิกรณ์ ($Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $\gamma=15$, $Da=0.7$, $b=0.35$, $Le=2000$, $Da_D = 4 \cdot 10^{-7}$, $\gamma_D = 18$, แอมพลิจูด = 0.01 และความถี่ = 0.0016)

ภาพที่ 10 ค่าอุณหภูมิไร้หน่วยสูงสุดเริ่มจาก 0 แล้วมีค่ามากขึ้นเรื่อยๆ จนกระทั่งเข้าสู่สถานะคงตัวที่ค่าหนึ่งจนกระทั่งที่เวลา 0 กราฟก็เริ่มมีการแกว่งขึ้นลง หลังจากนั้นแอมพลิจูดในของอุณหภูมิไร้หน่วยสูงสุดมีค่ามากขึ้นเรื่อยๆ จนเริ่มจะเข้าสู่แอมพลิจูดคงที่ หากปฏิกรณ์ถูกรบกวนด้วยอุณหภูมิขาเข้าของสารป้อนในขณะเดียวกันที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ปฏิกิริยา ปฏิกิริยา กำพอนที่เกิดขึ้นจะได้รับผลกระทบจากอัตราการเสื่อมสภาพนี้ด้วย จะเห็นว่าอุณหภูมิสูงสุดภายในปฏิกรณ์มีการแกว่งขึ้นลงด้วยแอมพลิจูดที่สูงขึ้นเมื่อเวลาผ่านไป เป็นผลเนื่องมาจากระยะจากปลายทางเข้าของปฏิกรณ์ถึงตำแหน่งที่มีอุณหภูมิสูงสุดมีการเคลื่อนย้ายห่างออกไปสู่ปลายทางออกของปฏิกรณ์ จึงทำให้ปรากฏการณ์ DIFI มีความรุนแรงมากขึ้น เพราะคลื่นความร้อนและมวลสารสามารถแยกจากกันได้มากขึ้น

จากการทดลอง (ในภาพที่ 10) เมื่อมีการรบกวนด้วยคลื่น sine wave ด้วยความถี่ต่างๆ หนึ่งก็มีการตอบสนองและเมื่อเปลี่ยนความถี่ก็จะมีผลที่เปลี่ยนไป จากเหตุการณ์ที่ผ่านมาบางความถี่ที่ให้อุณหภูมิสูงขึ้นมากจึงเป็นเหตุสำคัญที่ทำให้ต้องตระหนัก ถึงความสำคัญของค่าความถี่ของระบบ

ที่ถูกรบกวน เลขจึงมาศึกษาอย่างละเอียด เมื่อมีการเปลี่ยนความถี่จะมีผลอย่างไร โดยพิจารณาจาก คำนี gain factor ซึ่งนำมาใช้ในการบ่งชี้ถึงความแตกต่าง โดยที่ gain factor มีนิยามดังนี้

$$\text{Gain Factor} = \frac{(T_{\max, \text{transient}} - T_{\max, \text{initial steady state}})}{\text{step size of the inlet temperature}}$$



ภาพที่ 11 Resonance curves สำหรับ γ_D ต่าง ๆ

การทดลองนี้เพื่อหาความสัมพันธ์ของค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) กับความถี่ จากรูปเส้นกราฟทั้งหมดมีลักษณะคล้ายระฆังคว่ำแต่จุดสูงสุดของยอดไม่เปลี่ยน โดยกราฟที่มีค่า γ_D สูงสุดมีแอมพลิจูดของโค้งมากที่สุด และลดลงตามค่า γ_D น้อยสุด เป็นระบบที่ไม่มีอาการเสื่อมสภาพหรือ $\gamma_D = 0$ จากการทดลองเมื่อมีการเพิ่มค่า γ_D หรือมีการเสื่อมสภาพเร็วขึ้นเป็นผลทำให้มีการขยายตัวความสูงของคลื่นที่รบกวนมากขึ้น เป็นผลมาจากค่าสูงทำให้มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาเร็วทำให้ช่วงการเกิดปฏิกิริยา (reaction zone) มีการขยายตัวทำให้เกิดปรากฏการณ์ DIFI ได้ง่าย และเมื่อความถี่น้อยๆ กล่าวคือเสมือนระบบมีการเปลี่ยนจนเข้าสู่สภาวะคงตัวแล้วจึงค่อยมีการเปลี่ยนแปลงอีก แต่ถ้ามีความถี่สูงเสมือนเปลี่ยนแปลงขึ้น-ลงเร็วมากจนระบบไม่สามารถตอบสนองได้ทัน ซึ่งคล้ายกับไม่มีการเปลี่ยนแปลง จึงเป็นเหตุผลทำให้ความถี่ที่ก่อให้เกิดค่า Gain factor สูงที่สุด นั้นไม่อยู่ที่ตำแหน่งเดียวกันขึ้นอยู่กับปัจจัย $Pe_1, Pe_2, \gamma, Da, b$ และ Le

จากการศึกษาปรากฏการณ์กำหนดของปฏิกรณ์แบบอัดแน่นในช่วงความถี่ 0.0004-0.0050 ในขณะที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาเกิดขึ้นพร้อมกัน พบว่ากรณีที่เกิดการเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็วจะทำให้การขยายของปรากฏการณ์กำหนดมีมากขึ้น ดังแสดงในภาพที่ 11 แต่หากความถี่ของการรบกวนอุณหภูมิทางเข้าของสารป้อนแตกต่างจากความถี่ธรรมชาติของระบบมาก การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาจะมีผลค่อนข้างน้อยต่อปรากฏการณ์กำหนด

การคำนวณหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อทำนายค่าความถี่ธรรมชาติของระบบ

ผลของการทดลองทั้งหมดบ่งบอกถึงความสำคัญของเรื่องความถี่ที่ควรใส่ใจ เพื่อเป็นการป้องกันไม่ให้เกิดความเสียหายต่ออุปกรณ์และผู้ใช้อุปกรณ์ เนื่องจากบางความถี่นั้นสามารถก่อให้เกิดการพุ่งขึ้นอย่างรวดเร็วของอุณหภูมิได้มากจากปรากฏการณ์กำหนด จึงเป็นเหตุที่ทำให้ต้องทราบค่าความถี่ธรรมชาติของระบบนั้นๆ เพื่อหลีกเลี่ยงการดำเนินการที่สภาวะนั้น อย่างไรก็ตามการตรวจสอบการดำเนินการที่จะหาค่าความถี่ธรรมชาติของระบบจะต้องทดลองมากมายและเสียเวลามากเวลาไปใช้ในงานจริงและไม่สะดวกในการที่จะหาค่า น่าจะเป็นการดีถ้ามีแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สามารถทำนายค่าความถี่ธรรมชาติ โดยไม่ต้องทดลองหลายๆ ครั้ง

จากการศึกษาพบว่าแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ได้จากการทดลองเพื่อคำนวณค่าความถี่ธรรมชาติ (Resonance frequency) ขึ้นอยู่กับตัวแปรทั้งหมด 6 ค่า ได้แก่ γ , Le, Pe₁, Pe₂, Da, และ b

ตารางที่ 1 ช่วงของค่าในตัวแปรต่างๆ

| ตัวแปร | ช่วง |
|-----------------|--------------|
| γ | 9 ถึง 25 |
| Le | 500 ถึง 5000 |
| Pe ₁ | 200 ถึง 700 |
| Pe ₂ | 40 ถึง 150 |
| Da | 0.2 ถึง 0.7 |
| b | 0.3 ถึง 0.5 |

นำค่าตัวแปรสุ่มในตาราง ข 2 ไปดำเนินการทดลอง ซึ่งได้มาจากการสุ่มค่าในตารางที่ 1 โดยที่ทุกเงื่อนไขต้องทำการทดลองที่ความถี่ 0.0005- 0.0050 โดยเพิ่มทีละ 0.0005 (ทั้งหมด 30 เงื่อนไข เงื่อนไขละ 10 ความถี่ รวม 300 การทดลอง) ใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ Pseudo-

homogeneous ปฏิกริยาอันดับ 1 และเป็นปฏิกริยาคายความร้อน จะได้ผลการทดลองนำมาหาค่า gain factor (วิธีหาคณวนก ก.1) และสามารถหาค่าความถี่ธรรมชาติ (วิธีหาคณวนก ก.2) แสดงในตารางที่ ข 3 โดยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์จะอยู่ในรูปแบบของ Power law

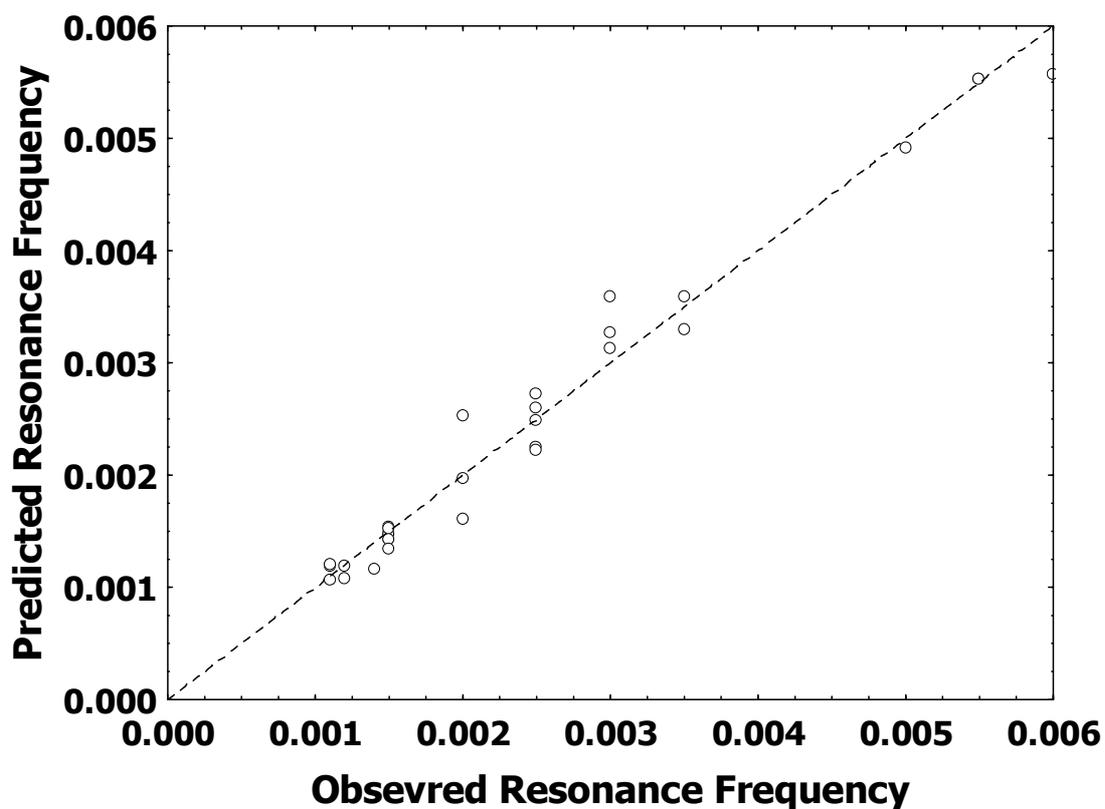
$$\text{Resonance frequency} = a\gamma^b Le^c Pe_1^d Pe_2^e Da^f b^g$$

ซึ่งค่าสัมประสิทธิ์ต่าง ๆ จะหาได้จากโปรแกรม แสดงในตารางที่ 2

ตารางที่ 2 ค่าสัมประสิทธิ์ต่างๆ ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

| parameter | สัมประสิทธิ์ |
|-----------|--------------|
| a | 1.415 |
| b | -0.133 |
| c | -0.986 |
| d | -0.126 |
| e | 0.513 |
| f | 0.230 |
| g | -0.298 |

เมื่อนำค่าความถี่ที่หาได้จากการทดลองกับความถี่ที่ได้จากการแบบจำลอง (ข้อมูลจากตารางที่ ข 3) มาวาดกราฟจะได้กราฟแสดงดังภาพที่ 12

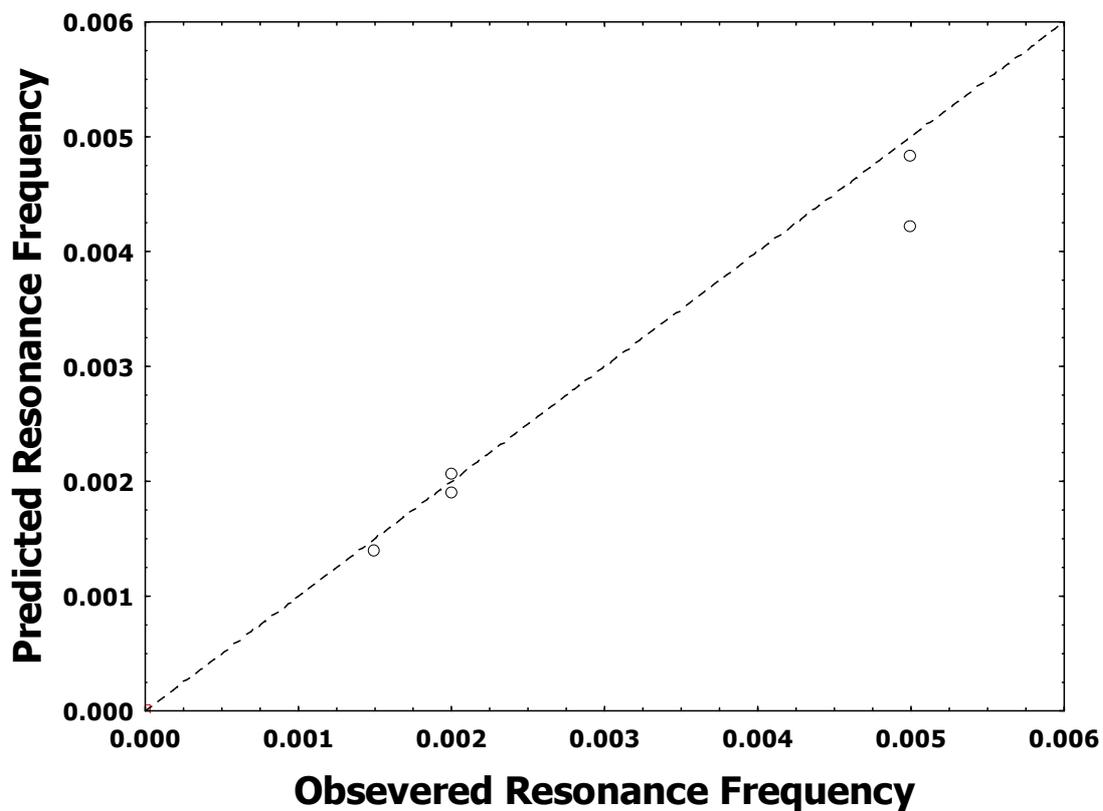


ภาพที่ 12 ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณแบบจำลองที่หาได้

ภาพที่ 12 เป็นรูปความสัมพันธ์ระหว่างค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองกับค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

$$\text{Resonance frequency} = 1.415\gamma^{-0.133} Le^{-0.986} Pe_1^{-0.0126} Pe_2^{0.513} Da^{0.230} b^{-0.298}$$

ภาพที่ได้จะมีการกระจายของจุด อยู่บนเส้น 1 ต่อ 1 พอดี กัน จึงนำแบบจำลองไปทดสอบ โดยการทำการทดลองเพื่อทดสอบค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากแบบจำลอง เป็นจำนวน 5 การทดลอง แสดงในตาราง ข 5 จะได้ผลการทดลองตาม ตาราง ข 6 ซึ่งแปลงเป็นความถี่ได้ตาม ตาราง ข 6



ภาพที่ 13 ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณแบบจำลองของตัวอย่างที่นำมาตรวจสอบ

ภาพที่ 13 เป็นรูปความสัมพันธ์ระหว่างค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองเพื่อตรวจสอบความแม่นยำของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่หามาได้กับค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่หาออกมา ผลที่ได้จะกระจายตัวอยู่รอบๆ เส้น 1 ต่อ 1 ซึ่งผลเป็นที่น่าพอใจ

การพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (Overshoot temperature)

ปรากฏการณ์ที่สำคัญอีกปรากฏการณ์หนึ่งคือการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (overshoot temperature) โดยบางการทดลองหรือเงื่อนไขจะเกิดปรากฏการณ์นี้ จากการทดลองที่ผ่านมาพบว่าการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาและอัตราการเกิดปฏิกิริยา ส่งผลให้เกิดปรากฏการณ์พุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (อุณหภูมิพุ่งขึ้นนิยามว่าอุณหภูมิที่สูงขึ้นมากกว่าร้อยละ 5 ของอุณหภูมิสูงสุดที่สภาวะสมดุล) กล่าวคือ เมื่อมีการเสื่อมสภาพอย่างช้าๆ จะไม่เกิดเหตุการณ์นี้ แต่ถ้ามีการเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็ว ก็จะเกิดปรากฏการณ์นี้ขึ้นได้ เนื่องจากคลื่นของโมเลกุลที่ยังไม่ได้ถูกใช้ไปอันเนื่องมาจากตัวเร่งปฏิกิริยาได้เสื่อมสภาพไป จึงได้เคลื่อนตัวไปยังตำแหน่งถัดเข้าไปข้างในและเมื่อความเข้มข้นสูงขึ้นมากกว่าทางเข้า (ความเข้มข้นไร้น้อยกว่า 1) ก็ก่อให้เกิดปฏิกิริยาที่รุนแรงส่งผลให้อุณหภูมิ ณ จุดนั้นพุ่งขึ้นอย่างรวดเร็ว อย่างไรก็ตามถ้ามีการเสื่อมสภาพเร็วมากๆ (อย่างเช่นกรณีที่สารป้อนเป็นพิษต่อตัวเร่งปฏิกิริยา) ก็จะไม่เกิดการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ เพราะสารป้อนเมื่อกระทบกับตัวเร่งปฏิกิริยา ก็จะเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็วแม้ว่า คลื่น โมเลกุลของสารป้อนจะไหลถัดเข้าไปภายในเครื่องปฏิกรณ์ ก็จะเกิดการเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็วเช่นกัน อย่างไรก็ตามไม่สามารถบอกเกณฑ์ที่แน่นอนด้วยค่าใดค่าหนึ่งจากอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาและอัตราการเกิดปฏิกิริยาได้ จึงได้พยายามค้นหาเงื่อนไขในการเกิดปรากฏการณ์นี้ ด้วยการทดลองโดยออกแบบการทดลองสามค่า γ_1 (9-25), γ_2 (5.5-25), Da_1 (0.2-0.7) และ Da_2 (10^{-3} - 10^{-8}) กำหนดค่าคงที่ $Le = 2000$, $b = 0.35$, $Pe_1 = 300$, $Pe_2 = 40$ ดังตาราง ข 8 เป็นจำนวน 56 ตัวอย่าง และสรุปได้ว่าเกณฑ์ในการเกิดขึ้นอยู่กับสัดส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา โดยเก็บค่าที่ตำแหน่งอุณหภูมิสูงสุดหลังจากที่มีการเสื่อมสภาพ ($\tau = 30000.5$) สามารถเป็นดัชนีบ่งชี้การเกิดปรากฏการณ์นี้ได้ โดยสามารถแบ่งได้เป็น 3 ช่วง ช่วงแรกมีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาที่เร็วมาก (สัดส่วนต่ำกว่า 500) ช่วงถัดมา ตัวเร่งปฏิกิริยาเสื่อมสภาพไม่เร็วหรือไม่ช้าจนเกินไป (สัดส่วนประมาณ 500-20000) และในช่วงสุดท้าย (สัดส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา มากกว่า 20000) มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาที่ช้ามาก

ในกรณีที่สัดส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา น้อยกว่า 500 จะไม่เกิดปรากฏการณ์ดังกล่าว อันเนื่องมาจากคลื่นมวลสารของสารป้อนพอเคลื่อนที่ไปกระทบกับตัวเร่งปฏิกิริยา ทำให้ ตัวเร่งปฏิกิริยาเสื่อมสภาพลงอย่างรวดเร็ว ทำให้สารตั้งต้นไม่สามารถเกิดปฏิกิริยาได้สมบูรณ์ คลื่นของสารตั้งต้นก็จะไหลไปในตำแหน่งถัดไปในเครื่องปฏิกรณ์ แต่ก็เกิดเหตุการณ์เหมือนเดิมคือตัวเร่งปฏิกิริยาเสื่อมสภาพอย่างรวดเร็วทำให้เกิดปฏิกิริยาได้ไม่รุนแรง อย่างไรก็ตามถ้าสัดส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการ

เสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยามากกว่า 500 ขึ้นไปและไม่เกินประมาณ 20000 จะเกิดการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ เนื่องจากสารตั้งต้นจะเกิดปฏิกิริยาไม่สมบูรณ์จากการที่ตัวเร่งเสื่อมลงปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์ ส่งผลให้สารป้อนไหลไปยังส่วนถัดไปในเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งเป็นการทำให้ความเข้มข้นของสารตั้งต้นในตำแหน่งถัดไปที่ติดกัน สูงขึ้นอย่างรวดเร็วและทำให้ปฏิกิริยาเกิดอย่างรุนแรง ที่บริเวณที่เกิดปฏิกิริยาเคมีมีอุณหภูมิสูงขึ้นหรือที่เรียกว่าปรากฏการณ์ การพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ อย่างไรก็ตาม ถ้าสัดส่วนมากกว่าประมาณ 20000 ก็จะไม่เกิดปรากฏการณ์ดังกล่าว เพราะว่าสัดส่วนมากแสดงถึงอัตราการเสื่อมสภาพต่ำมากๆ ซึ่งแสดงว่าตัวเร่งปฏิกิริยาเสื่อมประสิทธิภาพช้ามากหรือเปรียบได้ว่าเกือบจะไม่เสื่อมสภาพ ซึ่งส่งผลทำให้ สารตั้งต้นสามารถเกิดปฏิกิริยาได้สมบูรณ์ ณ ที่บริเวณนั้น

สรุปและข้อเสนอแนะ

จากการศึกษาปัจจัยต่างๆ ที่มีผลต่อประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา อันได้แก่ ค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) และ Da_D (Damkohler number) พบว่า ผลการทดลองที่ได้สามารถสรุปได้ดังนี้

ค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) และ Da_D สูงจะมีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยามากกว่าที่ค่าต่ำ และจุดที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาสูงสุดจะอยู่ในบริเวณกลางๆ ที่ทำปฏิกิริยา ยกเว้นในกรณีที่มีค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) ต่ำๆ จุดที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาจะอยู่ที่บริเวณช่วงต้นของเครื่องปฏิกรณ์ และในกรณีที่มีค่าพลังงานกระตุ้นของการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา (γ_D) เท่ากับ 0 จุดที่เสื่อมสภาพจะเริ่มต้นตั้งแต่ว่าทางเข้าของเครื่องปฏิกรณ์และเป็นจุดที่มีหิมคประสิทธิภาพความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยามากที่สุด

การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาและอัตราการเกิดปฏิกิริยา อาจส่งผลให้เกิดปรากฏการณ์คลื่นก่อนการสิ้นสุดของปฏิกิริยา (Pre-extinction wave) หรือการพุ่งขึ้นของอุณหภูมิ (การพุ่งขึ้นของอุณหภูมิต้องมากกว่า 5% ของอุณหภูมิสูงสุดที่สภาวะคงตัว ก่อนมีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา) โดยขึ้นอยู่กับค่าสัมบูรณ์ของสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ถ้าสัดส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาหลักกับอัตราการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยามากกว่า 500 ขึ้นไปและไม่เกินประมาณ 20000 จะเกิดปรากฏการณ์พุ่งขึ้นของอุณหภูมิ

การเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยามีส่วนเสริมให้ปรากฏการณ์การแกว่งของอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์มากยิ่งขึ้น อันเนื่องมาจากสาเหตุการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยา ทำให้บริเวณของการเกิดปฏิกิริยานั้นยืดออกไปทางท้ายเครื่องปฏิกรณ์ ทำให้เกิดความไม่สมดุลของความเร็วของคลื่น โมเลกุลกับความเร็วจนคลื่นความร้อน ซึ่งนำไปสู่การขยายตัวของอุณหภูมิที่กวัดแกว่งภายในปฏิกรณ์

จากการศึกษาพบว่าแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ได้จากการทดลองเพื่อคำนวณค่าความถี่ธรรมชาติ (Resonance frequency) ขึ้นอยู่กับตัวแปรทั้งหมด 6 ค่า ได้แก่ γ , Le, Pe_1 , Pe_2 , Da, และ b โดยมีความสัมพันธ์ดังนี้

$$\text{Resonance frequency} = 1.415\gamma^{-0.133} Le^{-0.986} Pe_1^{-0.126} Pe_2^{0.513} Da^{0.230} b^{-0.298}$$

ข้อเสนอแนะ

ค่าความถี่ที่นำมาใช้ในการสร้างแบบจำลองควรจะทำให้ละเอียดมากกว่านี้ ไม่ควรจะกระโดดข้าม เช่น 0.0001, 0.0002, 0.0003 จากเดิม 0.0004, 0.0008, 0.0012 เพื่อจะได้ค่าที่นำมาสร้างแบบจำลองได้ถูกต้องแม่นยำมากขึ้น เนื่องจากในการทดลองเริ่มแรกยังไม่ทราบถึงความสำคัญของระยะห่างของค่าความถี่ที่ใช้ ประกอบกับในแต่ละเงื่อนไข ต้องทำอย่างน้อย 10 ค่าความถี่ (0.0005-0.0050) อีกทั้งในช่วงแรกยังไม่ทราบว่าผลการทดลองที่ได้จะมีความสัมพันธ์กัน และถ้าทำค่าความถี่ที่ใกล้กัน (เป็น 0.0001, 0.0002, 0.0003) อีกทั้งในช่วงค่าความถี่เท่าเดิมจะทำให้จำนวนการทดลองเพิ่มมากขึ้นเป็น 50 ค่าความถี่ หรืออาจจะทำทุกๆ 0.0005, 0.0010, 0.0015 แล้วถ้าพบว่าค่าความถี่ธรรมชาติของระบบนั้นอยู่ที่ช่วงใด ให้ทำการทดลองช่วงนั้นให้ละเอียดมากยิ่งขึ้น ซึ่งคาดว่าจะทำให้ได้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สามารถทำนายค่าได้แม่นยำยิ่งขึ้น

นำค่าตำแหน่ง X (ตำแหน่งที่อุณหภูมิสูงสุดของระบบเริ่มเข้าสู่สมดุลเป็นตำแหน่งแรกภายในเครื่องปฏิกรณ์) มาใช้ในแบบจำลอง จากการสังเกตผลการทดลองพบว่ามีแนวโน้มที่ตำแหน่งค่า X อาจจะมีความสัมพันธ์กับตัวแปรภายในกลุ่ม γ , Le, Pe_1 , Pe_2 , Da และ b เนื่องด้วยในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ใช้ในการทำนายค่าความถี่ธรรมชาติของระบบมีตัวแปรอยู่ถึง 6 ค่า ซึ่งเป็นการยุ่งยากในการที่จะคำนวณให้ได้ค่าความถี่ธรรมชาติออกมา หรือสามารถหาความสัมพันธ์ภายในตัวแปรทั้ง 6 ตัวมีความสัมพันธ์กันเอง ตัวหนึ่งมีค่าเพิ่มอีกตัวหนึ่งมีค่าลดลงเป็นสัดส่วนกัน ทำให้สามารถตัดตัวแปรกลุ่มนั้นทิ้งไปได้

ในการใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบแพ็คกิ้ง หลังจากที่มีการเสื่อมสภาพหรือใช้งานไประยะเวลาหนึ่ง จะเห็นได้ว่าประสิทธิภาพความว่องไวในแต่ละจุดภายในปฏิกรณ์นั้นมีการเสื่อมสภาพที่ไม่เท่ากัน จนกระทั่งจุดใดจุดหนึ่งหมดความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาหรือเสื่อมสภาพจนหมดประสิทธิภาพจะทำให้เกิดปฏิกิริยาได้ไม่คิ่ดั้งเดิม กล่าวคือสารตั้งต้นไม่ถูกเปลี่ยนไปเป็นผลิตภัณฑ์ได้ทั้งหมดหรืออีกนัยหนึ่งว่า ใช้ประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบแพ็คกิ้งได้ไม่มีประสิทธิภาพ และจากสังเกตพบว่าโดยส่วนใหญ่จุดที่มีการเสื่อมสภาพมากที่สุดจะอยู่บริเวณกลางของปฏิกรณ์

และด้านทางเข้าและขาออกถูกใช้งานในสัดส่วนที่น้อยลงหรือยังไม่สัมประสิทธิ์ความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่สูงอยู่ จึงอาจทำการทดลองโดยแบ่งตัวเร่งปฏิกิริยาในปฏิกรณ์ออกเป็น 2 ส่วน (ส่วนหน้าและส่วนหลัง) แล้วทดลองโดยใช้เวลาเท่าเดิม แต่เมื่อเวลาครั้งหนึ่งของเวลาทั้งหมดให้สลับตำแหน่งตัวเร่งปฏิกิริยา เพื่อให้จุดที่มีการเสื่อมสภาพของตัวเร่งปฏิกิริยานั้นไม่ใช่จุดเดิมแล้วนำจุดที่ยังมีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยามาแทนในจุดที่มีการใช้งานมากที่สุด

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

- Abdul-kareem H.K., Hudgins R.R., Silveston P.L. (1980). Forced cycling of the catalytic oxidation of CO over a V_2O_5 catalyst. II. Temperature cycling, **Chemical Engineering Science**, 35, 2085-2088.
- Butt, J. B., and Petersen, E. E. (1998). Activation, deactivation and poisoning of catalysts. **New York: Academic Press.**
- Chen, Y.C., and Luss, D. (1998). Wrong-way behavior of packed-bed reactors: Influence of interphase transport. **AIChE Journal**, 35, 1148-1156.
- Crider, J.E., Foss A.S., (1996). Computational Studies of Transients in Packed Tubular Chemical Reactors, **AIChE journal**. 12, 514-522.
- Jaree A., (2001). Stabilization of a packed-bed reactor in the presence of differential flow instability. **Ph.D. thesis in Chemical Engineering**, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada.
- Jaree A., Hudgins R.R., Budman H., Silveston P.L., Yakhnin V., Menzinger M., (2003). Hysteresis and extinction waves in catalytic CO oxidation caused by perturbations of reactant concentration in a packed-bed reactor, **Industrial and Engineering Chemical Research**, 42, 1662-1673.
- Jaree A., Hudgins R.R., Budman H., Silveston P.L., Yakhnin V., Menzinger M., (2003a). Amplication of inlet temperature disturbances in a packed-bed reactor for CO oxidation over Pt/ Al_2O_3 . **Chemical Engineering Science**, 58, 833 – 839.
- Jensen, K.F., Ray, W.H., (1982). The bifurcation behavior of tubular reactors. **Chemical Engineering Science**, 37, 199-222.

- Mehta P.S., Sams W.N., Luss D. (1981). Wrong-Way Behavior of packed-Bed Reactors : I. The Pseudo-homogeneous Model. **AIChE Journal**, 27, 234.
- Oh, S.H., Cavendish, C., (1982). Transients in monolithic catalytic converters: response to step function changes in feedstream temperature as related to controlling automobile emission. **Industrial Engineering Chemistry and Production Research Development**, 21, 29.
- Rovinsky, A., and Menzinger, M. (1992). Chemical instability induced by a differential flow (Part 1: Theory). **Physical Review Letters**, 69, 350.
- Rovinsky, A., and Menzinger, M. (1993). Chemical instability induced by a differential flow, II: experiments. **Physics Review Letters**, 70, 778.
- Yakhnin V., Menzinger M., (1995). Absolute instability induced by differential transport in the tubular packed-bed reactor with recycling, **Chemical Engineering Science**, 50, 1591–1593.
- Yakhnin V., Menzinger M., (1995). Convective instability induced by differential transport in the tubular packed-bed reactor, **Chemical Engineering Science**, 50, 2853–2859.
- Yakhnin V., Menzinger M., (1998). Moving hot spot and resonance in adiabatic packed-bed reactors. **AIChE journal**, 44(5), 1222-1225.

ภาคผนวก ก

ตัวอย่างการคำนวณ

การคำนวณหาค่า Gain Factor

$$Gain Factor = \frac{(T_{\max,transient} - T_{\max,initial\ steady\ state})}{step\ size\ of\ the\ inlet\ temperature}$$

ตัวอย่างการคำนวณ

$$T_{\max,transient} = 1.365864$$

$$T_{\max,initial\ steady\ state} = 1.346533$$

Step size of the inlet temperature = 0.01

$$Gain Factor = \frac{(1.365864 - 1.346533)}{0.01}$$

$$Gain Factor = 1.933125$$

ก็จะได้ค่า Gain Factor ที่ระบบหนึ่งและความถี่ค่าหนึ่ง ($Pe_1=300$, $Pe_2=40$, $b=0.35$, $Da=0.4$, $Le=2000$, $\gamma=15$ และที่ความถี่ 0.0004)

การหาค่าความถี่ธรรมชาติของระบบ

ในการหาค่าความถี่ของระบบนั้น (จะต้องทราบค่า γ , L_e , P_{e1} , P_{e2} , D_a , b) จะต้องสุ่มค่าความถี่ให้เป็นช่วง กล่าวคือ ทำการทดลองที่เงื่อนไขเดียวกัน แต่ที่ความถี่ระหว่าง 0.0004-0.0050 แล้วเก็บข้อมูลมาหาค่า Gain Factor ทุกความถี่ แสดงในตารางที่ ก 1

ตารางที่ ก 1 ค่าความถี่ของระบบตัวอย่างและค่า Gain Factor ที่คำนวณ

| ความถี่ | Gain Factor |
|---------------|-----------------|
| 0.0004 | 1.933125 |
| 0.0008 | 3.106874 |
| 0.0010 | 3.557572 |
| 0.0012 | 3.881317 |
| 0.0016 | 4.192587 |
| 0.0020 | 4.17643 |
| 0.0030 | 3.397827 |
| 0.0040 | 2.364838 |
| 0.0050 | 1.513249 |

ค่า Gain factor ที่มากที่สุดในการเงื่อนไขแบบเดียวกันแต่ต่างกันที่ความถี่จะเป็นค่าความถี่ธรรมชาติ เพราะฉะนั้นค่าความถี่ 0.0016จะเป็นค่าความถี่ธรรมชาติ (Resonance frequency) ของระบบนี้

การคำนวณหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ได้จากการทดลองเพื่อคำนวณค่าความถี่ธรรมชาติ (Resonance frequency) ขึ้นอยู่กับตัวแปรทั้งหมด 6 ค่า ได้แก่ γ , Le, Pe_1 , Pe_2 , Da, และ b แสดงในตารางที่ ข 2

ตารางที่ ก 2 ช่วงของค่าในตัวแปรต่าง ๆ

| ตัวแปร | ช่วง |
|----------|--------------|
| γ | 9 ถึง 25 |
| Le | 500 ถึง 5000 |
| Pe_1 | 200 ถึง 700 |
| Pe_2 | 40 ถึง 150 |
| Da | 0.2 ถึง 0.7 |
| b | 0.3 ถึง 0.5 |

นำค่าตัวแปรตาราง ข 2 ไปดำเนินการทดลอง โดยที่ทุกเงื่อนไขต้องทำการทดลองที่ความถี่ 0.0005-0.0050 โดยเพิ่มทีละ 0.0005 (ทั้งหมด 30 เงื่อนไข เงื่อนไขละ 10 ความถี่ รวม 300 การทดลอง) จะได้ผลการทดลอง แสดงในตารางที่ ข 3 โดยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์จะอยู่ในรูปแบบของ power law

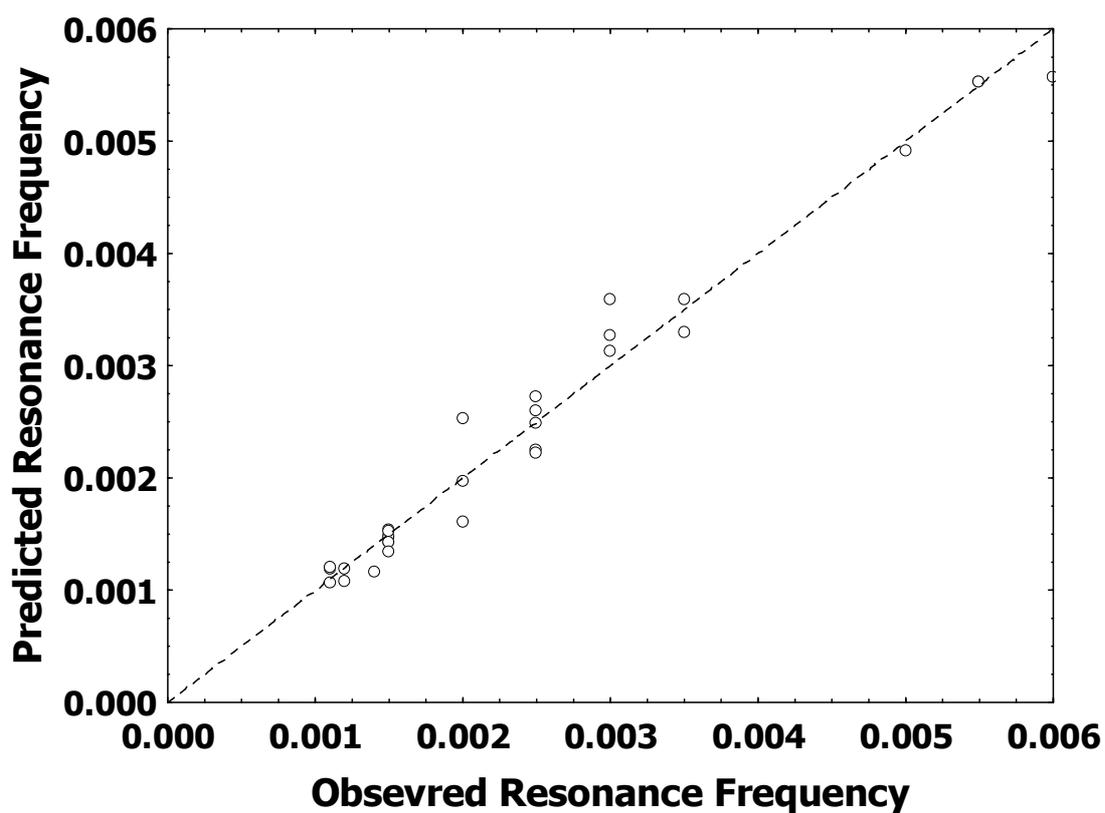
$$\text{Resonance frequency} = a\gamma^b Le^c Pe_1^d Pe_2^e Da^f b^g$$

ซึ่งค่าสัมประสิทธิ์ต่าง ๆ จะหาได้จากโปรแกรมแสดงในตารางที่ ก 3

ตารางที่ 3 ค่าสัมประสิทธิ์ต่างๆ ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

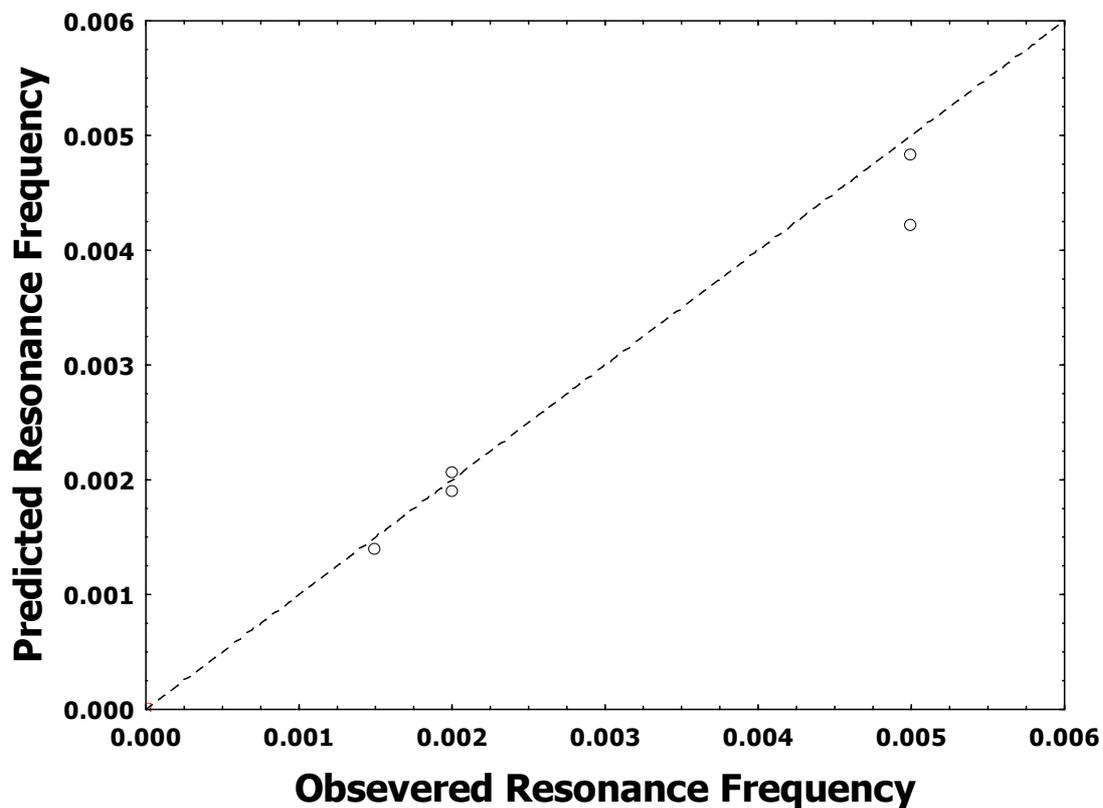
| parameter | สัมประสิทธิ์ |
|-----------|--------------|
| a | 1.415 |
| b | -0.133 |
| c | -0.986 |
| d | -0.126 |
| e | 0.513 |
| f | 0.230 |
| g | -0.298 |

เมื่อนำค่าคาบเวลาที่หาได้จากการทดลองกับค่าที่ได้จากการแบบจำลอง (ข้อมูลจากตารางที่ ข.3) มาวาดกราฟจะได้กราฟแสดงดังภาพที่ ก 1



ภาพที่ ก 1 ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณแบบจำลองที่หาได้

พอได้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์แล้วต้องในตรวจสอบ โดยการทดลองเพื่อทดสอบ ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากแบบจำลอง เป็นจำนวน 5 การทดลอง แสดงใน ตาราง ข 5 จะได้ผลการทดลองตาม ตาราง ข 6 ซึ่งแปลงเป็นค่าคาบได้ตามตาราง ข 6



ภาพที่ ก 2 ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากการคำนวณแบบจำลองของตัวอย่าง ที่นำมาตรวจสอบ

ภาคผนวก ข
ข้อมูลการทดลอง

ตารางที่ ข 1 ค่าตัวแปรต่าง ๆ เพื่อใช้ศึกษาความถี่ธรรมชาติของระบบ

| run | γ | Le | Pe1 | Pe2 | Da | b |
|-----|----------|------|-----|-----|------|------|
| 1 | 15 | 2000 | 300 | 40 | 0.40 | 0.35 |
| 2 | 20 | 1500 | 400 | 60 | 0.20 | 0.3 |
| 3 | 17 | 1800 | 600 | 100 | 0.30 | 0.4 |
| 4 | 12 | 2200 | 500 | 120 | 0.50 | 0.5 |
| 5 | 10 | 2300 | 200 | 80 | 0.35 | 0.45 |

ตารางที่ ข 2 ค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อใช้ในการหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

| run | γ | Le | Pe1 | Pe2 | Da | b |
|-----|----------|------|-----|-----|------|------|
| 1 | 15 | 3000 | 300 | 40 | 0.55 | 0.30 |
| 2 | 20 | 1500 | 400 | 60 | 0.50 | 0.35 |
| 3 | 14 | 3500 | 600 | 100 | 0.40 | 0.40 |
| 4 | 9 | 2500 | 500 | 120 | 0.60 | 0.50 |
| 5 | 10 | 2000 | 200 | 80 | 0.70 | 0.45 |
| 6 | 25 | 5000 | 300 | 150 | 0.30 | 0.30 |
| 7 | 22 | 500 | 400 | 50 | 0.25 | 0.40 |
| 8 | 19 | 1000 | 500 | 70 | 0.20 | 0.50 |
| 9 | 13.5 | 4000 | 600 | 90 | 0.60 | 0.40 |
| 10 | 23 | 4500 | 700 | 110 | 0.40 | 0.45 |
| 11 | 18 | 3300 | 420 | 60 | 0.30 | 0.45 |
| 12 | 14 | 2800 | 210 | 120 | 0.47 | 0.40 |
| 13 | 15.5 | 3400 | 230 | 50 | 0.60 | 0.30 |
| 14 | 17 | 940 | 430 | 100 | 0.40 | 0.50 |
| 15 | 13.5 | 3900 | 500 | 60 | 0.40 | 0.48 |
| 16 | 12 | 4800 | 350 | 70 | 0.45 | 0.45 |
| 17 | 24 | 1200 | 450 | 130 | 0.40 | 0.30 |
| 18 | 21 | 3600 | 550 | 110 | 0.35 | 0.40 |
| 19 | 15 | 800 | 650 | 50 | 0.55 | 0.30 |
| 20 | 15.9 | 1178 | 205 | 83 | 0.46 | 0.41 |
| 21 | 13.9 | 4666 | 350 | 112 | 0.43 | 0.37 |
| 22 | 9.7 | 3891 | 671 | 59 | 0.60 | 0.48 |
| 23 | 15 | 1052 | 478 | 46 | 0.32 | 0.45 |
| 24 | 22.1 | 2871 | 533 | 146 | 0.66 | 0.40 |
| 25 | 17.2 | 2877 | 425 | 109 | 0.52 | 0.37 |

ตารางที่ ข 2 ค่าตัวแปรต่าง ๆ เพื่อใช้ในการหาแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (ต่อ)

| run | γ | Le | Pe1 | Pe2 | Da | b |
|-----|----------|------|-----|-----|------|------|
| 26 | 21 | 4063 | 439 | 59 | 0.54 | 0.31 |
| 27 | 11.1 | 2743 | 483 | 75 | 0.54 | 0.42 |
| 28 | 20.7 | 1762 | 564 | 107 | 0.62 | 0.35 |
| 29 | 20.1 | 4295 | 374 | 74 | 0.61 | 0.31 |
| 30 | 17 | 2945 | 419 | 110 | 0.53 | 0.37 |

ตารางที่ 3 ผลการทดลองค่าความถี่ธรรมชาติของที่ทำการสุม 30 ตัวอย่าง

| run | ความถี่ |
|-----|---------|
| 1 | 0.0015 |
| 2 | 0.0030 |
| 3 | 0.0020 |
| 4 | 0.0025 |
| 5 | 0.0030 |
| 6 | 0.0015 |
| 7 | 0.0035 |
| 8 | 0.0030 |
| 9 | 0.0015 |
| 10 | 0.0014 |
| 11 | 0.0012 |
| 12 | 0.0025 |
| 13 | 0.0015 |
| 14 | 0.0060 |
| 15 | 0.0012 |
| 16 | 0.0011 |
| 17 | 0.0055 |
| 18 | 0.0015 |
| 19 | 0.0055 |
| 20 | 0.0050 |
| 21 | 0.0015 |
| 22 | 0.0012 |
| 23 | 0.0035 |
| 24 | 0.0020 |
| 25 | 0.0025 |

ตารางที่ ข 3 ผลการทดลองค่าความถี่ธรรมชาติของที่ทำกรสู่ม 30 ตัวอย่าง (ต่อ)

| run | ความถี่ |
|-----|---------|
| 26 | 0.0010 |
| 27 | 0.0020 |
| 28 | 0.0035 |
| 29 | 0.0015 |
| 30 | 0.0025 |

หมายเหตุ ค่าความถี่ที่ได้อยู่ในช่วง 0.0010-0.0015 มีการทำการทดลองเพิ่มเพื่อความละเอียด

ตารางที่ ข 4 คาบเวลาที่ได้จากการทดลองและค่าคาบเวลาที่ได้จากแบบจำลอง

| run | การทดลอง | แบบจำลอง |
|-----|----------|----------|
| 1 | 0.0015 | 0.0014 |
| 2 | 0.0030 | 0.0030 |
| 3 | 0.0020 | 0.0017 |
| 4 | 0.0025 | 0.0027 |
| 5 | 0.0030 | 0.0030 |
| 6 | 0.0015 | 0.0016 |
| 7 | 0.0035 | 0.0064 |
| 8 | 0.0030 | 0.0037 |
| 9 | 0.0015 | 0.0015 |
| 10 | 0.0014 | 0.0013 |
| 11 | 0.0012 | 0.0013 |
| 12 | 0.0025 | 0.0026 |
| 13 | 0.0015 | 0.0015 |
| 14 | 0.0060 | 0.0053 |
| 15 | 0.0012 | 0.0011 |
| 16 | 0.0011 | 0.0011 |
| 17 | 0.0055 | 0.0055 |
| 18 | 0.0015 | 0.0016 |
| 19 | 0.0055 | 0.0051 |
| 20 | 0.0050 | 0.0045 |
| 21 | 0.0015 | 0.0015 |
| 22 | 0.0012 | 0.0012 |
| 23 | 0.0035 | 0.0032 |
| 24 | 0.0020 | 0.0025 |
| 25 | 0.0025 | 0.0023 |

ตารางที่ ข 4 คาบเวลาที่ได้จากการทดลองและค่าคาบเวลาที่ได้จากแบบจำลอง (ต่อ)

| run | การทดลอง | แบบจำลอง |
|-----|----------|----------|
| 26 | 0.0010 | 0.0012 |
| 27 | 0.0020 | 0.0020 |
| 28 | 0.0035 | 0.0035 |
| 29 | 0.0015 | 0.0014 |
| 30 | 0.0025 | 0.0022 |

หมายเหตุ ค่าความถี่ที่ได้อยู่ในช่วง 0.0010-0.0015 มีการทำการทดลองเพิ่มเพื่อความละเอียด

ตารางที่ 5 ค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อใช้ในทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

| test | γ | Le | Pe1 | Pe2 | Da | b |
|------|----------|------|-----|-----|------|------|
| 1 | 24.3 | 1449 | 483 | 104 | 0.64 | 0.31 |
| 2 | 14.1 | 2651 | 542 | 80 | 0.35 | 0.43 |
| 3 | 12.6 | 1425 | 443 | 122 | 0.55 | 0.37 |
| 4 | 13 | 4959 | 699 | 115 | 0.54 | 0.4 |
| 5 | 12.6 | 3521 | 677 | 119 | 0.61 | 0.35 |

ตารางที่ 6 ผลการทดลองค่าความถี่ธรรมชาติของ 5 ตัวอย่างเพื่อทดสอบแบบจำลอง

| test | ความถี่ |
|------|---------|
| 1 | 0.0050 |
| 2 | 0.0020 |
| 3 | 0.0050 |
| 4 | 0.0015 |
| 5 | 0.0020 |

ตารางที่ ๗ ค่าความถี่ที่ได้จากการทดลองและค่าความถี่ที่ได้จากแบบจำลอง ของ 5 ตัวอย่าง

| test | การทดลอง | แบบจำลอง |
|------|----------|----------|
| 1 | 0.0050 | 0.0042 |
| 2 | 0.0020 | 0.0019 |
| 3 | 0.0050 | 0.0048 |
| 4 | 0.0015 | 0.0014 |
| 5 | 0.0020 | 0.0021 |

ตารางที่ ข 8 ค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อใช้ศึกษาคลื่นก่อนการสิ้นสุดปฏิกิริยา

| run | γ | γD | Da | DaD | 30001 | | |
|-----|----------|------------|------|---------|-----------|-----------|-----------|
| | | | | | F | dt(coe) | f/dt(coe) |
| 1 | 22.7 | 9.1 | 0.25 | 3.5E-03 | 12.950687 | -0.010458 | -1238 |
| 2 | 22.7 | 9.6 | 0.51 | 2.1E-03 | 25.120131 | -0.007453 | -3371 |
| 3 | 17.0 | 7.0 | 0.62 | 2.7E-03 | 7.543745 | -0.004787 | -1576 |
| 4 | 17.5 | 12.0 | 0.61 | 3.0E-04 | 8.599269 | -0.001374 | -6260 |
| 5 | 21.9 | 11.5 | 0.49 | 3.6E-03 | 22.015409 | -0.018859 | -1167 |
| 6 | 17.9 | 15.7 | 0.30 | 3.9E-03 | 3.944823 | -0.033245 | -119 |
| 7 | 18.4 | 23.6 | 0.49 | 4.0E-03 | 7.441861 | -0.255992 | -29 |
| 8 | 24.3 | 18.2 | 0.69 | 3.5E-03 | 31.504965 | -0.051694 | -609 |
| 9 | 18.3 | 15.5 | 0.60 | 1.6E-03 | 10.549943 | -0.015777 | -669 |
| 10 | 15.2 | 16.0 | 0.56 | 2.2E-03 | 4.101273 | -0.019360 | -212 |
| 11 | 17.9 | 14.6 | 0.31 | 1.5E-03 | 4.125281 | -0.010104 | -408 |
| 12 | 21.9 | 15.1 | 0.44 | 2.8E-03 | 20.606656 | -0.031040 | -664 |
| 13 | 19.4 | 11.8 | 0.57 | 6.0E-04 | 13.701551 | -0.002987 | -4588 |
| 14 | 24.6 | 12.4 | 0.26 | 3.0E-04 | 24.954113 | -0.020850 | -1197 |
| 15 | 18.3 | 23.2 | 0.53 | 5.7E-04 | 8.918470 | -0.029197 | -305 |
| 16 | 20.0 | 10.2 | 0.59 | 2.5E-03 | 16.700823 | -0.009549 | -1749 |
| 17 | 23.7 | 21.6 | 0.25 | 3.6E-03 | 16.854077 | -0.180743 | -93 |
| 18 | 19.8 | 18.3 | 0.40 | 1.6E-03 | 9.827828 | -0.029195 | -337 |
| 19 | 20.9 | 12.5 | 0.41 | 3.6E-03 | 14.242871 | -0.021588 | -660 |
| 20 | 17.4 | 6.9 | 0.37 | 4.0E-03 | 4.490721 | -0.006399 | -702 |

ตารางที่ ๘ ค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อใช้ศึกษาคลื่นก่อนการสิ้นสุดปฏิกิริยา (ต่อ)

| run | γ | γD | Da | DaD | 30001 | | |
|-----|----------|------------|------|---------|-----------|-----------|-----------|
| | | | | | F | dt(coe) | f/dt(coe) |
| 21 | 24.3 | 17.6 | 0.22 | 1.2E-04 | 18.328408 | -0.002288 | -8009 |
| 22 | 18.4 | 24.7 | 0.33 | 5.0E-04 | 5.066534 | -0.031763 | -160 |
| 23 | 14.3 | 19.4 | 0.66 | 1.0E-03 | 3.955475 | -0.017549 | -225 |
| 24 | 19.2 | 14.5 | 0.33 | 8.1E-05 | 6.442436 | -0.000584 | -11030 |
| 25 | 24.6 | 13.1 | 0.68 | 1.5E-03 | 32.267238 | -0.008357 | -3861 |
| 26 | 21.1 | 20.8 | 0.43 | 6.8E-04 | 16.234150 | -0.024934 | -651 |
| 27 | 17.5 | 9.3 | 0.43 | 1.9E-03 | 5.551554 | -0.004762 | -1166 |
| 28 | 20.9 | 23.7 | 0.47 | 4.9E-04 | 16.398438 | -0.033285 | -493 |
| 29 | 16.3 | 22.6 | 0.49 | 3.0E-03 | 4.432809 | -0.120647 | -37 |
| 30 | 15.8 | 21.2 | 0.46 | 1.8E-03 | 3.735296 | -0.048589 | -77 |
| 31 | 17.5 | 7.8 | 0.65 | 3.0E-04 | 9.291168 | -0.000637 | -14585 |
| 32 | 16.7 | 15.9 | 0.65 | 1.0E-04 | 7.398540 | -0.000963 | -7682 |
| 33 | 21.3 | 19.4 | 0.59 | 1.3E-03 | 21.526374 | -0.032843 | -655 |
| 34 | 21.8 | 13.1 | 0.41 | 3.0E-03 | 18.987551 | -0.021793 | -871 |
| 35 | 15.7 | 20.9 | 0.54 | 2.4E-03 | 4.368139 | -0.062973 | -69 |
| 36 | 20.2 | 5.8 | 0.21 | 6.1E-04 | 4.845420 | -0.000807 | -6005 |
| 37 | 18.8 | 21.9 | 0.32 | 2.3E-03 | 5.345605 | -0.082271 | -65 |
| 38 | 24.5 | 8.8 | 0.29 | 1.9E-03 | 25.813751 | -0.006374 | -4050 |
| 39 | 19.3 | 12.0 | 0.68 | 3.0E-03 | 16.001915 | -0.015930 | -1005 |
| 40 | 18.0 | 13.0 | 0.56 | 6.4E-04 | 8.900508 | -0.003374 | -2638 |

ตารางที่ ข 8 ค่าตัวแปรต่างๆ เพื่อใช้ศึกษาค้นก่อนการสิ้นสุดปฏิกิริยา (ต่อ)

| run | γ | γD | Da | DaD | 30001 | | |
|-----|----------|------------|------|---------|-----------|-----------|-----------|
| | | | | | F | dt(coe) | f/dt(coe) |
| 41 | 19.4 | 22.1 | 0.41 | 3.2E-03 | 8.521252 | -0.138934 | -61 |
| 42 | 16.6 | 23.8 | 0.64 | 1.7E-03 | 6.743162 | -0.094692 | -71 |
| 43 | 15.0 | 12.2 | 0.69 | 1.4E-03 | 5.008250 | -0.005857 | -855 |
| 44 | 15.7 | 7.3 | 0.54 | 4.1E-04 | 4.489570 | -0.000682 | -6588 |
| 45 | 14.7 | 7.8 | 0.48 | 5.0E-04 | 3.043748 | -0.000880 | -3459 |
| 46 | 19.3 | 9.7 | 0.36 | 1.3E-03 | 7.440319 | -0.003751 | -1983 |
| 47 | 18.0 | 12.4 | 0.34 | 3.7E-03 | 4.755533 | -0.016451 | -289 |
| 48 | 17.3 | 17.2 | 0.63 | 5.6E-04 | 8.352971 | -0.007866 | -1062 |
| 49 | 19.5 | 14.5 | 0.62 | 3.9E-03 | 15.306560 | -0.034783 | -440 |
| 50 | 16.8 | 19.3 | 0.37 | 2.8E-03 | 3.744033 | -0.050996 | -73 |
| 51 | 15.7 | 19.4 | 0.46 | 2.0E-03 | 3.664345 | -0.036058 | -102 |
| 52 | 24.0 | 22.7 | 0.26 | 2.5E-04 | 20.775463 | -0.012098 | -1717 |
| 53 | 15.7 | 14.7 | 0.36 | 1.5E-03 | 2.787840 | -0.009557 | -292 |
| 54 | 23.1 | 16.9 | 0.27 | 2.9E-03 | 16.378812 | -0.045289 | -362 |
| 55 | 23.5 | 16.7 | 0.48 | 3.6E-03 | 27.069675 | -0.051123 | -529 |
| 56 | 18.0 | 24.9 | 0.34 | 6.6E-04 | 4.666749 | -0.045902 | -102 |

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

| | |
|--------------------------------|---|
| ชื่อ –นามสกุล | นายบุญเลิศ บุญสำราญจิตต์ |
| วัน เดือน ปี ที่เกิด | วันที่ 4 เดือนธันวาคม พ.ศ.2524 |
| สถานที่เกิด | จังหวัดกรุงเทพมหานคร |
| ประวัติการศึกษา | วศ.บ. (วิศวกรรมเคมี) มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์ (พ.ศ.2546) |
| สถานที่ทำงานปัจจุบัน | คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ |
| ทุนการศึกษาที่ได้รับ | |
| ผลงานดีเด่นและรางวัลทางวิชาการ | |