



ใบรับรองวิทยานิพนธ์
บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี)

ปริญญญา

วิศวกรรมเคมี

วิศวกรรมเคมี

สาขา

ภาควิชา

เรื่อง ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปตามโซนต่อความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้

Effect of Assumption of Equal Gas Diffusivity Coefficient in All Zones in a Three-zone TAP Reactor on the Accuracy of Estimated Rate Constant

นามผู้วิจัย นางสาวสตรีรัตน์ เรืองฤทธิวงศ์

ได้พิจารณาเห็นชอบโดย

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว พรหมวุฒิ, D.Sc.)

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม

(รองศาสตราจารย์เมตตา เจริญพานิช, D.Eng.)

หัวหน้าภาควิชา

(รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว พรหมวุฒิ, D.Sc.)

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์รับรองแล้ว

(รองศาสตราจารย์กัญญา ชีระกุล, D.Agr.)

คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่ เดือน พ.ศ.

สืบศิริ มทววิทยาลัยเกษตรศาสตร์

วิทยานิพนธ์

เรื่อง

ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อ
ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้

Effect of Assumption of Equal Gas Diffusivity Coefficient in All Zones in a Three-zone
TAP Reactor on the Accuracy of Estimated Rate Constant

โดย

นางสาวสตรีรัตน์ เรืองฤทธิวงศ์

เสนอ

บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
เพื่อความสมบูรณ์แห่งปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี)

พ.ศ. 2553

สตรีรัตน์ เรืองฤทธิ์วงศ์ 2553: ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซ
เท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา
ที่หาได้ ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี) สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว
พรรณวดี, D.Sc. 99 หน้า

ข้อมูลการทดลองจากการทดลองแทปเป็น ไค่งตอบสนองซึ่งความเข้มเป็นสัดส่วนกับ
อัตราการไหลขาออกของก๊าซ ไค่งตอบสนองถูกใช้สำหรับการวิเคราะห์สัมประสิทธิ์การแพร่ของ
ก๊าซและค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา ปฏิกรณ์แทปสามโซนเป็นปฏิกรณ์ที่ใช้ทั่วไปในการทดลอง
แทปซึ่งประกอบด้วยโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาประกอบด้วยอนุภาคเฉื่อยสองโซน สัมประสิทธิ์
การแพร่ของก๊าซแต่ละโซนขึ้นกับขนาดและชนิดของอนุภาค ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การ
แพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนจะสะดวกต่อการหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา ผลของสมมติฐานที่
ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อความแม่นยำของ
ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้ถูกศึกษาในงานวิจัยนี้โดยอาศัยการจำลองแบบเชิงตัวเลข
ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาถูกหาจาก 3 วิธีคือ การเทียบไค่งอัตราการไหลขาออก การเทียบไค่ง
อัตราการไหลขาออกที่อุณหภูมิไอซ์พื้นที่ได้ไค่งให้เท่ากับหนึ่งและการคำนวณโดยใช้นิพจน์การ
แปลงผันของก๊าซ ผลการคำนวณแสดงว่าค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้จะแม่นยำเมื่อเบค
อนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาบาง การแปลงผันของก๊าซต่ำและอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซใน
โซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนตัวเร่งปฏิกิริยาใกล้เคียงหนึ่ง เมื่ออัตราส่วนความยาวของโซนตัวเร่ง
ปฏิกิริยาต่อความยาวของปฏิกรณ์เป็น $1/30$ และอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซน
อนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ระหว่าง 0.667-1.333 ความคลาดเคลื่อนของค่าคงที่
อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้มีค่าไม่เกิน 2% เมื่อการแปลงผันของก๊าซอยู่ระหว่าง 0.01-0.50
สำหรับทุกวิธีที่ใช้หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา

สตรีรัตน์ เรืองฤทธิวงศ์ 2553: ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซ
เท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา
ที่หาได้ ปรัญญาวិวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี) สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว
พรรณวดี, D.Sc. 99 หน้า

Satreerat Rueangrittiwong 2010: Effect of Assumption of Equal Gas Diffusivity
Coefficient in All Zones in a Three-zone TAP Reactor on the Accuracy of Estimated
Rate Constant. Master of Engineering (Chemical Engineering), Major Field: Chemical
Engineering, Department of Chemical Engineering. Thesis Advisor:
Associate Professor Phungphi Phanawadee, D.Sc. 99 pages.

สตรีรัตน์ เรืองฤทธิ์วงศ์ 2553: ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซ
เท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา
ที่หาได้ ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต (วิศวกรรมเคมี) สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี
ภาควิชาวิศวกรรมเคมี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก: รองศาสตราจารย์ผ่องแผ้ว
พรรณวดี, D.Sc. 99 หน้า

The experimental data from a TAP experiment is a response curve whose intensity is proportional to the exit gas flow rate. The response curve is used for estimation of the gas diffusivity and reaction rate constant. A three-zone TAP reactor usually applied in the TAP experiment contains a catalyst zone sandwiched between two inert zones. The gas diffusivity in each zone depends on the size and type of particles. An assumption of equal gas diffusivity in all zones would ease estimation of the reaction rate constant. The effect of assumption of equal gas diffusivity in all zones in the three-zone TAP reactor on accuracy of the estimated reaction rate constant was studied in this work by numerical simulation. The reaction rate constant was estimated by 3 methods including exit flow rate curve fitting, unit area normalized exit flow rate curve fitting and a calculation by the conversion expression. It was found that an accurate estimated reaction rate constant is obtained when the catalyst bed is thin, the gas conversion is low and the ratio of the gas diffusivity in the inert bed to that in the catalyst bed is close to unity. When the ratio of the length of the catalyst bed to the length of the reactor is $1/30$ and the ratio of the gas diffusivity in the inert zone to that in the catalyst zone ranges from 0.667 to 1.333 , the error of estimated reaction rate constant is less than 2% when the gas conversion ranges from 0.10 to 0.50 for all the estimated methods.

Student's signature

Thesis Advisor's signature

กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณ รศ.ดร. ผึ้งผาย พรรณวดี อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก ที่ได้ช่วยเหลือในการวางแผนการวิจัยในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ตลอดจนการให้คำปรึกษาแนะนำ พร้อมทั้งแก้ไขข้อบกพร่องต่างๆ ทั้งในส่วนเนื้อหาของเนื้อหาที่เกี่ยวข้องกับวิทยานิพนธ์และในส่วนของการระบในการนำเสนอ ตลอดจนการตรวจแก้ไขวิทยานิพนธ์จนกระทั่งเสร็จสมบูรณ์

ขอขอบพระคุณ รศ.ดร.เมตตา เจริญพานิช อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม รศ.ดร.อภิญา ดวงจันทร์ ประธานการสอบและ อาจารย์ ดร. พชรินทร์ วรรณกุล สำหรับสำหรับ คำปรึกษาและแนะนำในการทำวิทยานิพนธ์อย่างดียิ่ง

ขอกราบขอบพระคุณคุณพ่อ วิชัย เรื่องฤทธิวงศ์, คุณแม่อาภรณ์ เรื่องฤทธิวงศ์,และขอขอบคุณคุณวัชรินทร์ เรื่องฤทธิวงศ์, คุณสิริพัฒน์ กาญจนะ นิสิตปริญญาโทและปริญญาเอก ภาควิชาวิศวกรรมเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ทุกท่าน ที่ให้คำแนะนำรวมถึงให้ความช่วยเหลือและสนับสนุนพร้อมทั้งเป็นกำลังใจในการทำวิทยานิพนธ์จนสำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี

ขอขอบคุณ คุณ ชูเกียรติ จรุงมโนรมย์ และคุณพิชามาศ ตันเต็ก ที่กรุณาให้คำปรึกษาเกี่ยวกับโปรแกรมคอมพิวเตอร์และอนุเคราะห์โค้ดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการทำวิทยานิพนธ์ครั้งนี้

ขอขอบคุณ โครงการพัฒนานักศึกษาด้านการศึกษาและวิจัย ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ภายใต้งานสนับสนุนความเป็นเลิศด้านปิโตรเคมีและวัสดุขั้นสูง สำนักงานคณะกรรมการอุดมศึกษา ผู้ให้ทุนสนับสนุนงานวิจัยและทุนการศึกษาแก่ผู้วิจัย งานวิจัยสำเร็จลุล่วง

ประโยชน์อันใดเนื่องจากวิทยานิพนธ์เล่มนี้ ขอมอบแด่ตระกูลเรื่องฤทธิวงศ์ ครูอาจารย์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมีและภาควิชาเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์และผู้มีส่วนเกี่ยวข้องที่ไม่ได้เอ่ยนามทุกท่านที่ได้ให้คำแนะนำและความช่วยเหลือตลอดมา

สตรีรัตน์ เรื่องฤทธิวงศ์

เมษายน 2553

สารบัญ

หน้า

สารบัญ	(1)
สารบัญตาราง	(2)
สารบัญภาพ	(7)
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ	(10)
คำนำ	1
วัตถุประสงค์	3
การตรวจเอกสาร	4
อุปกรณ์และวิธีการ	17
อุปกรณ์	17
วิธีการ	17
ผลและวิจารณ์	27
สรุปและข้อเสนอแนะ	50
สรุป	50
ข้อเสนอแนะ	51
เอกสารและสิ่งอ้างอิง	52
ภาคผนวก	54
ภาคผนวก ก ลักษณะและการทำงานของระบบปฏิกรณ์ TAP-2	55
ภาคผนวก ข ขั้นตอนการคำนวณและระเบียบวิธี MOL (Method of lines)	64
ภาคผนวก ค ผลลัพธ์เชิงตัวเลขของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา	77
ประวัติการศึกษา และการทำงาน	99

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
1 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3 กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย	32
2 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/10 กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย	33
3 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/30 กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย	34
4 d_D ของอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ ในปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีอัตราส่วนความยาวของเขตตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (l_2/L) เป็น 1/3, 1/10 และ 1/30 กรณีที่ใช้วิธีวิเคราะห์โมเมนต์	35
 ตารางผนวกที่	
ค1 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.333	78
ค2 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.500	79

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางผนวกที่	หน้า	
ค3	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667	80
ค4	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333	81
ค5	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500	82
ค6	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000	83
ค7	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000	84
ค8	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้โคงเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.333	85

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางผนวกที่	หน้า	
ค9	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.500	86
ค10	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667	87
ค11	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333	88
ค12	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500	89
ค13	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000	90
ค14	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกลบมัลไลซ์ให้พื้นที่ใต้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000	91

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางผนวกที่	หน้า	
ค15	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.333	92
ค16	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.500	93
ค17	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667	94
ค18	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333	95
ค19	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500	96
ค20	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณี ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับ อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาค ตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000	97

สารบัญตาราง (ต่อ)

ตารางผนวกที่	หน้า
ค21	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีสี่ที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000
	98

สารบัญภาพ

ภาพที่	หน้า
1 ระบบปฏิกิริยาแบบ	4
2 ภาพร่างปฏิกิริยาแบบหนึ่งโซน	6
3 ภาพร่างปฏิกิริยาแบบสามโซน	9
4 ขั้นตอนการวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ ภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนใน ปฏิกิริยาแบบสามโซน	18
5 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับโค้งแบบจำลอง(●)กรณีวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย กรณีที่มี r_D เท่ากับ 0.333(ก), 0.667(ข), 1.333(ค) และ 3.000(ง) สำหรับปฏิกิริยาแบบที่มี I_2/L เท่ากับ 1/3	28
6 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับโค้งแบบจำลอง (▲) โดยใช้นิพจน์เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายใน ปฏิกิริยา กรณีที่ค่า r_D เท่ากับ 0.333(ก), 0.667(ข), 1.333(ค) และ 3.000(ง) สำหรับปฏิกิริยาแบบสามโซนที่มี I_2/L เท่ากับ 1/3	29
7 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับโค้งแบบจำลอง(●)กรณีวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยที่ r_D เท่ากับ 3.000 กรณีที่ I_2/L เป็น 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค)	30
8 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับโค้งแบบจำลอง(▲) ซึ่งคำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายใน ปฏิกิริยาที่ r_D เท่ากับ 3.000 สำหรับปฏิกิริยาแบบสามโซนที่มี I_2/L เท่ากับ 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค)	31

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่	หน้า
9 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ $1/3$ เมื่อ r_D เท่ากับ 0.333 (ก), 0.500(ข)และ 0.667(ค) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติ (■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(■)	37
10 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ $1/3$ เมื่อ r_D 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติ (■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง (□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(■)	39
11 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ $1/10$ เมื่อ r_D 0.333 (ก), 0.500(ข)และ0.667(ค)จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติ (■) การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง (□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ (■)	41
12 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ $1/10$ เมื่อ r_D 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง (□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ (■)	43
13 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่ L_2/L เท่ากับ $1/30$ เมื่อ r_D 0.333 (ก), 0.500(ข)และ0.667(ค) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติ(■),การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(■)	45

สารบัญภาพ (ต่อ)

ภาพที่		หน้า
14	การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ 1/30 เมื่อ r_D เท่ากับ 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จาก การวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์(■), การเทียบ โค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่อุณหภูมิไดอะกอนัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ (๓)	48
ภาพผนวกที่		
ก1	ระบบปฏิกรณ์ TAP-2	56
ก2	ระบบสุญญากาศในระบบปฏิกรณ์ TAP-2	58
ก3	ระบบปฏิกรณ์ TAP-2: (1) พัลส์วาล์วความเร็วสูง (2) มานิโฟลด์ (3) ปฏิกรณ์ (4) แมสสเปกโตรมิเตอร์ (5) วาล์วสุญญากาศ (6) วาล์วควบคุมการไหลโดยมือ (7) สวิตช์ไฟฟ้า	59
ก4	ลักษณะผลตอบสนองแทปซึ่งแสดงชุดของการฉีดก๊าซและผลตอบสนองที่ได้ จากแมสสเปกโตรมิเตอร์	62
ข1	ความสัมพันธ์ตามจุดของพิกัดในแนวแกนของปฏิกรณ์แทป	68
ข2	ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางเข้าของปฏิกรณ์แทปและฟังก์ชันเดลตา	69
ข3	ความสัมพันธ์ตามจุดของสภาวะขอบภายในปฏิกรณ์แทป (ก)สภาวะขอบที่ ξ_1 , (ข)สภาวะขอบที่ ξ_2	72
ข4	ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางออกของปฏิกรณ์แทป	74
ข5	แผนภาพขั้นตอนการจำลองแบบ โค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซกรณีที่มี การแพร่เพียงอย่างเดียว	76

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

A	=	พื้นที่หน้าตัดของเบดปฏิกรณ์ (ตารางเมตร)
C	=	ความเข้มข้นของก๊าซทำปฏิกิริยา (โมลต่อตารางเมตร)
C^*	=	ความเข้มข้นไร้มิติของก๊าซทำปฏิกิริยา นิยามโดย $\left(C^* \equiv \frac{C}{N_p / \varepsilon AL} \right)$
d_D	=	อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซต่อสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซในโซนที่สอง นิยามโดย $(d_D \equiv D_{avg} / D_2)$
D	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซ (ตารางเมตรต่อวินาที)
$D_{1,3}^{ig}$	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อย (ตารางเมตรต่อวินาที)
$D_{1,3}^{ig}$	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉื่อย (ตารางเมตรต่อวินาที)
D_2^{ig}	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (ตารางเมตรต่อวินาที)
D_2^{rg}	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (ตารางเมตรต่อวินาที)
D_{avg}^{ig}	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซเฉื่อย (ตารางเมตรต่อวินาที)
D_{avg}^{rg}	=	สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซทำปฏิกิริยา (ตารางเมตรต่อวินาที)
F	=	อัตราการไหลขาออกของก๊าซ (โมลต่อวินาที)
F^*	=	อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ นิยามโดย $\left(F^* \equiv \frac{F \varepsilon_2 L^2}{N_p D_2} \right)$
k	=	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (ลูกบาศก์เมตรของก๊าซต่อโมล วินาที)
k^*	=	ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาไร้มิติ นิยามโดย $\left(k^* \equiv \frac{k \varepsilon_2 L^2}{D_2} \right)$
l_i	=	ความยาวของเบดที่ (เมตร)
L	=	ความยาวของปฏิกรณ์ (เมตร)
l_2/L	=	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์
M_i^*	=	โมเมนต์อันดับที่ i ของโค้งตอบสนอง

คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ (ต่อ)

MW_i	=	มวลโมเลกุลของก๊าซชนิดที่ i (กรัมต่อโมล)
N_p	=	จำนวนโมเลกุลของก๊าซที่ถูกพัลส์เข้าสู่ปฏิกรณ์ (โมล)
$\bar{r}$	=	รัศมีเฉลี่ยของอนุภาคของแข็งที่บรรจุในเบดนั้น (เมตร)
r_ε	=	อัตราส่วนเศษส่วนช่องว่างของเบดอนุภาคเฉื่อยต่อเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา นิยามโดย ($r_\varepsilon \equiv \varepsilon_{1,3}/\varepsilon_2$)
r_D	=	อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซน อนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา นิยามโดย ($r_D \equiv D_{1,3}^{rg}/D_2^{rg}$)
R	=	ค่าคงที่ของก๊าซ
R_p	=	รัศมีของอนุภาคของแข็ง (เมตร)
t	=	เวลา (วินาที)
t_{res}	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ (วินาที)
$t_{res,exp}$	=	เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ที่ได้จากการทดลอง (วินาที)
T_i	=	อุณหภูมิสัมบูรณ์ในระบบของก๊าซชนิดที่ i (เคลวิน)
X	=	การแปลงผันของก๊าซ
z	=	พิกัดระยะทางตามแนวแกนปฏิกรณ์ (เมตร)

สัญลักษณ์อักษรกรีก

ε	=	เศษส่วนช่องว่างของอนุภาคในเบด
$\varepsilon_{1,3}$	=	เศษส่วนช่องว่างของอนุภาคในเบดอนุภาคเฉื่อย (โซนที่หนึ่งและโซนที่สาม)
ε_2	=	เศษส่วนช่องว่างของอนุภาคในเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (โซนที่สอง)
τ	=	เวลาไร้มิติ นิยามโดย ($\tau \equiv tD_2/\varepsilon_2L^2$)
τ_p	=	แฟกเตอร์ความคดเคี้ยวในเบด
τ_{res}	=	เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ นิยามโดย ($\tau_{res} \equiv t_{res}D_2/\varepsilon_2L^2$)
$\tau_{res,exp}$	=	เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ที่ได้จากการทดลอง นิยามโดย ($\tau_{res,exp} \equiv t_{res,exp}D_2/\varepsilon_2L^2$)
ξ_i	=	พิกัดระยะทางไร้มิติตามแนวแกนปฏิกรณ์ นิยามโดย ($\xi_i \equiv l_i/L$)
$\delta(z-0^+)$	=	ฟังก์ชันเดลตาที่พิกัด $z=0^+$

ผลของสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนต่อความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้

Effect of Assumption of Equal Gas Diffusivity Coefficient in All Zones in a Three-zone TAP Reactor on the Accuracy of Estimated Rate Constant

คำนำ

แทป (TAP; Temporal analysis of product) (Gleaves *et al.* 1988, 1997) เป็นเทคนิคที่ได้รับการยอมรับในการศึกษาการเร่งปฏิกิริยาแบบวิวิธพันธุ์ (Heterogeneous catalysis) ในสถานะไม่คงตัว (Transient) การทดลองแทป (TAP experiment) ทำโดยการฉีดก๊าซปริมาณน้อยๆ ในลักษณะพัลส์ (Pulse) ผ่านเข้าไปยังปฏิกรณ์ขนาดเล็ก (Microreactor) ซึ่งภายในบรรจุอนุภาคเฉื่อยและหรืออนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา โมเลกุลของก๊าซเคลื่อนที่มาที่ทางออกของปฏิกรณ์ซึ่งมีการรักษาความดันไว้ประมาณ 10^{-8} ทอร์ โมเลกุลของก๊าซที่ทางออกของปฏิกรณ์ถูกตรวจวัดด้วยเครื่องแมสสเปกโตรมิเตอร์ (Mass spectrometer) ข้อมูลที่ได้จากการทดลองอยู่ในรูปโค้งตอบสนอง (Response) ที่ขึ้นกับเวลา ความเข้ม (Intensity) ของโค้งตอบสนองเป็นสัดส่วนกับอัตราการไหลของก๊าซที่ทางออก ขนาดและรูปร่างของโค้งตอบสนองขึ้นกับลักษณะการแพร่ของก๊าซ (Gas diffusion) และจลนพลศาสตร์เคมีที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์

ปฏิกรณ์แทปที่ใช้ในปัจจุบันหากจำแนกตามจำนวนโซนของอนุภาคภายในปฏิกรณ์จะมีแบบที่เรียกว่าปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน (One-zone reactor) และปฏิกรณ์แทปสามโซน (Three-zone reactor) ปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซนมีอนุภาคเฉื่อยหรืออนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาบรรจุอย่างสม่ำเสมอเต็มทั้งปฏิกรณ์ ส่วนปฏิกรณ์แทปสามโซนเป็นปฏิกรณ์ที่โซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ระหว่างโซนของอนุภาคเฉื่อย

ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์แทปถูกอธิบายด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์เพื่อใช้ในการแปลผลข้อมูลที่ได้จากการทดลอง การหาพารามิเตอร์ของระบบซึ่งได้แก่สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซ (Gas diffusivity coefficient) และค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (Rate constant) ทำได้โดยการนำโค้งตอบสนองที่ได้จากการทดลองมาเทียบกับโค้งตอบสนองที่คำนวณจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยใช้เกณฑ์กำลังสองน้อยที่สุด (Least squares) การหา

พารามิเตอร์ยังสามารถหาโดยวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ (Moment analysis) ของโค้งตอบสนอง โมเมนต์ที่นิยมใช้คือโมเมนต์อันดับศูนย์และโมเมนต์อันดับหนึ่งของโค้งอัตราการไหลขาออกของ ก๊าซ

จากความแตกต่างของขนาดอนุภาคและชนิดของอนุภาคในแต่ละโซนภายในปฏิกรณ์ แทปสามโซนทำให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในปฏิกรณ์แทปสามโซนมีค่าต่างกัน Shekhtman *et al.* (1999) ได้ใช้สมมติฐานที่ว่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซทุกโซนเท่ากันสำหรับปฏิกรณ์ แทปสาม โซนกรณีที่โซนตัวเร่งปฏิกิริยาบางเมื่อเทียบกับความยาวของปฏิกรณ์ สมมติฐานดังกล่าว ทำให้คำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาสะดวกขึ้น แต่ยังไม่มีการรายงานถึงความแม่นยำของ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณภายใต้สมมติฐานนี้

งานวิจัยนี้ศึกษาถึงความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ภายใต้ สมมติฐานที่กำหนดให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซน การศึกษาทำภายใต้กรณีเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง (First order irreversible reaction) ตัวเร่งปฏิกิริยาที่เป็นทรงกลมไม่มีรูพรุนและอุณหภูมิที่ทำการทดลองสม่ำเสมอตลอดทั้งปฏิกรณ์ โดยมีการเปลี่ยนค่าอัตราส่วนความยาวของโซนตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ให้แตกต่างกัน

วัตถุประสงค์

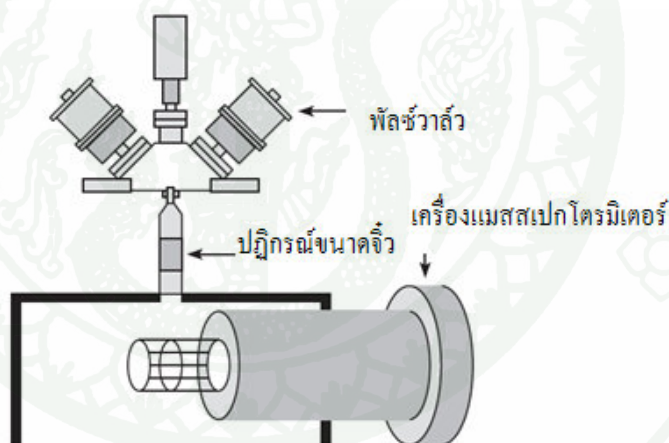
วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้เพื่อศึกษาความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาซึ่งคำนวณภายใต้สมมติฐานที่กำหนดให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซน

ขอบเขตของงานวิจัย

งานวิจัยนี้ทำการวิเคราะห์ผลโดยการจำลองแบบเชิงตัวเลขกรณีที่เกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง ภายใต้สภาวะการทดลองที่มีการแปลงผันของก๊าซ (Gas conversion) อยู่ระหว่าง 0.01-0.99 อนุภาคเฉื่อยและอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้เป็นทรงกลมไม่มีรูพรุน โดยขนาดรัศมีของอนุภาคของแข็งอยู่ระหว่าง 100-300 ไมโครเมตร และอุณหภูมิในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาสม่ำเสมอทั่วทั้งโซน การศึกษาได้ทำการเปลี่ยนค่าอัตราส่วนความหนาของโซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์เป็น $1/3$, $1/10$ และ $1/30$ โดยที่โซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ตรงกลางปฏิกรณ์

การตรวจเอกสาร

การวิจัยทางการเร่งปฏิกิริยามีวิวัฒนาการมุ่งเน้นการพัฒนาตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดใหม่ รวมทั้งพัฒนาทฤษฎีที่สามารถอธิบายกลไกการเกิดปฏิกิริยา (Reaction mechanism) และ จลนพลศาสตร์เคมี (Chemical kinetics) แทป (Temporal Analysis of Products; TAP) เป็นเทคนิคที่ได้รับการยอมรับในปัจจุบันสำหรับใช้ศึกษาปฏิกิริยาการเร่งแบบวิวิธพันธุ์ที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นของแข็งและตัวทำปฏิกิริยาเป็นก๊าซ การทดลองแทป (TAP experiment) ทำโดยการฉีดก๊าซปริมาณน้อย (10^{-10} โมล) ในลักษณะพัลส์ (Pulse) โดยพัลส์วาล์ว (Pulse valve) เข้าสู่ปฏิกรณ์ขนาดเล็ก (Microreactor) โมเลกุลของก๊าซเคลื่อนที่เข้าสู่ปฏิกรณ์ผ่านออกมาที่ทางออกของปฏิกรณ์และถูกตรวจวัดด้วยเครื่องแมสสเปกโตรมิเตอร์ (Mass spectrometer) ทางออกของปฏิกรณ์ถูกควบคุมความดันไว้ที่ 10^{-8} ทอร์ ส่วนประกอบของระบบปฏิกรณ์แทป (TAP reactor system) ถูกแสดงในภาพที่ 1



ภาพที่ 1 ระบบปฏิกรณ์แทป

ที่มา: Gleaves *et al* (1997)

ความดันที่ทางออกของปฏิกรณ์ที่ต่ำมากและจำนวนโมเลกุลของก๊าซที่ถูกพัลส์เข้าไปยังปฏิกรณ์มีปริมาณน้อยทำให้ความดันภายในปฏิกรณ์มีค่าต่ำมาก สภาวะดังกล่าวทำให้ระยะเคลื่อนตัวอิสระของโมเลกุล (Mean free path) ของก๊าซมีค่ามากเมื่อเทียบกับขนาดช่องว่างภายในปฏิกรณ์ ดังนั้น โมเลกุลของก๊าซจะกระทบกับอนุภาคของของแข็งหรือผนังของปฏิกรณ์มากกว่าที่จะกระทบ

กันเอง การแพร่ของก๊าซในสภาวะนี้เป็นการแพร่แบบนูดเซน (Knudsen diffusion) ลักษณะเฉพาะที่สำคัญของการแพร่แบบนี้คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซเอฟเฟกทีฟนูดเซนแต่ละชนิดจะไม่ขึ้นกับองค์ประกอบของก๊าซผสมและไม่ขึ้นกับความดัน สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนูดเซนของก๊าซใดๆ (Svoboda *et al.*, 1992) มีความสัมพันธ์กับสมบัติของก๊าซและลักษณะของระบบดังนี้

$$D = \frac{\varepsilon}{\tau_p} \frac{2\bar{r}}{3} \left(\frac{8RT}{\pi MW} \right)^{1/2} \quad (1)$$

เมื่อ D คือ สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนูดเซน (Effective Knudsen diffusivity) ของก๊าซ (ตารางเมตรต่อวินาที), R คือ ค่าคงที่ของก๊าซ, $\bar{r}$ คือ รัศมีเฉลี่ยของอนุภาคของแข็งที่บรรจุในเบคนั้น (เมตร), MW มวลโมเลกุลของก๊าซ (กรัมต่อโมล), ε คือ เศษส่วนช่องว่าง (Fractional voidage) ของอนุภาคในเบค (ปริมาตรของช่องว่างในเบคหารด้วยปริมาตรของเบค), τ_p คือ แฟกเตอร์ความคดเคี้ยว (Tortuosity factor) ในเบค

สำหรับอนุภาคทรงกลม ε มีค่าเท่ากับ 0.36 และค่า $\bar{r}$ (Huizenga, D.G., *et al.*, 1986) สามารถคำนวณได้ตามสมการที่ 2

$$\bar{r} = \frac{2\varepsilon}{3(1-\varepsilon)} R_p \quad (2)$$

เมื่อ R_p คือ รัศมีของอนุภาคของแข็ง (เมตร)

สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนูดเซนของก๊าซใดๆ ในแต่ละเบคสามารถคำนวณได้จากสัมประสิทธิ์การแพร่ของเอฟเฟกทีฟนูดเซนของก๊าซชนิดอื่นซึ่งแพร่ในเบคเดียวกันตามความสัมพันธ์ต่อไปนี้

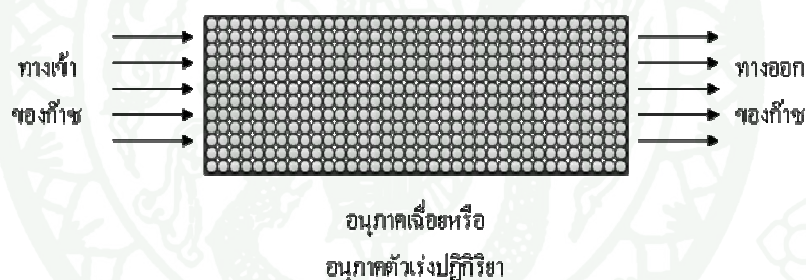
$$D_1 \frac{\sqrt{MW_1}}{\sqrt{T_1}} = D_2 \frac{\sqrt{MW_2}}{\sqrt{T_2}} \quad (3)$$

เมื่อ D_1, D_2 คือ สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซชนิดที่ 1 และ 2 ตามลำดับ
 MW_1, MW_2 คือ น้ำหนักโมเลกุลของก๊าซชนิดที่ 1 และ 2 ตามลำดับ
 T_1, T_2 คือ อุณหภูมิสัมบูรณ์ในระบบของก๊าซชนิดที่ 1 และ 2 ตามลำดับ

เนื่องจากสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซขึ้นกับชนิดและขนาดของอนุภาคที่ก๊าซแพร่ผ่าน ดังนั้นการแพร่ของก๊าซภายในปฏิกรณ์แท่งจึงขึ้นกับรูปแบบการจัดเรียงอนุภาคภายในปฏิกรณ์แท่ง การจัดเรียงอนุภาคในปฏิกรณ์แท่งที่ปัจจุบันมีการใช้และปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์ถูกอธิบายดังต่อไปนี้

แบบจำลองปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน

ปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนเป็นปฏิกรณ์ที่ภายในมีการบรรจุอนุภาคเฉื่อยหรืออนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอย่างสม่ำเสมอเต็มทั้งปฏิกรณ์ ภาพที่ 2 แสดงภาพร่างของปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน



ภาพที่ 2 ภาพร่างปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน

ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนอาจเกิดเพียงการแพร่ของก๊าซเพียงอย่างเดียวหรือเกิดการแพร่ของก๊าซพร้อมกับการเกิดปฏิกิริยาเคมี การเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนเกิดได้จากกรณีที่ทำการฉีดก๊าซเฉื่อยผ่านเข้าไปยังปฏิกรณ์แท่งที่บรรจุอนุภาคเฉื่อยหรืออนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเต็มทั้งปฏิกรณ์ หรือกรณีที่ฉีดก๊าซใดๆ ผ่านไปยังปฏิกรณ์แท่งที่บรรจุอนุภาคเฉื่อยเต็มทั้งปฏิกรณ์ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์กรณีการแพร่แบบนุดเซนของก๊าซเพียงอย่างเดียวภายในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนที่บรรจุด้วยอนุภาคของแข็งที่ไม่มีรูพรุนอย่างสม่ำเสมอถูกอธิบายด้วยสมการอนุพันธ์มวลของก๊าซใดๆ ในรูปของอนุพันธ์เชิงย่อย (Partial differential equation; PDE) ซึ่งแสดงได้ดังนี้

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (4)$$

เมื่อ C คือ ความเข้มข้นของก๊าซ (โมลต่อลูกบาศก์เมตร), t คือ เวลา (วินาที), z คือ พิกัดระยะทางตามแนวแกนปฏิกรณ์ (เมตร)

สำหรับกรณีเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง ก๊าซทำปฏิกิริยาถูกฉีดผ่านเข้าไปยังปฏิกรณ์แท่งซึ่งบรรจุอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอย่างสม่ำเสมอเต็มทั้งปฏิกรณ์ สมการอนุกรมมวลของก๊าซทำปฏิกิริยาสำหรับกรณีนี้เขียนได้ดังนี้

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - kC \quad (5)$$

เมื่อ k คือ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (ลูกบาศก์เมตรของก๊าซต่อโมล วินาที)

สภาวะเริ่มต้น (Initial condition, I.C.) และสภาวะขอบ (Boundary condition, B.C.) ที่สอดคล้องกับลักษณะทางกายภาพของระบบในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนเป็นดังนี้ (Gleaves *et al.*, 1988)

$$\text{สภาวะเริ่มต้น:} \quad t = 0, \quad C = \delta(z - 0^+) \frac{N_p}{\varepsilon A} \quad (6)$$

$$\text{สภาวะขอบ:} \quad z = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

$$z = L, \quad C = 0 \quad (8)$$

เมื่อ A คือ พื้นที่หน้าตัดของปฏิกรณ์ (ตารางเมตร), N_p คือ จำนวนโมเลกุลของก๊าซที่ถูกพัลส์เข้าสู่ปฏิกรณ์ (โมล), L คือ ความยาวของโซน (เมตร) และ $\delta(z - 0^+)$ คือ ฟังก์ชันเดลตา (Dirac delta function) ที่พิกัด $z = 0^+$

สมการที่ (6) กำหนดว่าก๊าซที่เวลาเริ่มต้นมีความเข้มข้นแสดงในรูปของฟังก์ชันเดลตาที่พิกัด $z = 0^+$ โดยที่ในแต่ละพัลส์มีก๊าซอยู่จำนวน N_p โมล สภาวะที่ทางเข้าของปฏิกรณ์ดังนี้

แสดงในสมการที่ (7) ถูกกำหนดให้ไม่มีการไหลเข้าออกของก๊าซ ส่วนที่ทางออกของปฏิกรณ์ (สมการที่ (8)) ถูกกำหนดให้ความเข้มข้นของก๊าซมีค่าเป็นศูนย์ (Gleaves *et al.*, 1997) เนื่องจากที่ทางออกเป็นสภาวะสูญญากาศอย่างยิ่ง

ข้อมูลจากการทดลองที่ได้อยู่ในรูปของความเข้มของสัญญาณไฟฟ้า (Intensity) ที่เป็นสัดส่วนกับอัตราการไหลขาออกของก๊าซ ดังนั้นผลเฉลยของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่ต้องการคืออัตราการไหลขาออกของก๊าซ (Gleaves *et al.*, 1997) ซึ่งหาจาก

$$F = -AD \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z=L} \quad (9)$$

เมื่อ F คือ อัตราการไหลขาออกของก๊าซ (โมลต่อวินาที), L คือ ความยาวของปฏิกรณ์ (เมตร)

วิธีการแยกตัวแปร (Separation of variables) ถูกนำมาใช้ในการหาผลเฉลยอัตราการไหลขาออกของก๊าซสำหรับกรณีการเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน ผลเฉลยของอัตราการไหลขาออกของก๊าซต่อจำนวน โมลของก๊าซเป็นดังนี้

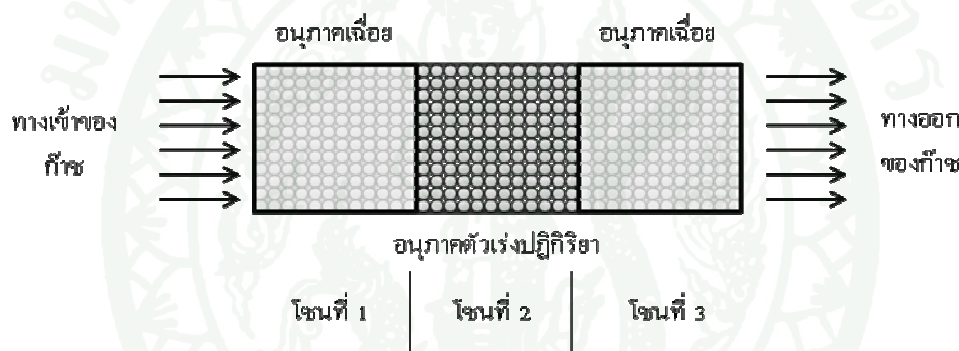
$$\frac{F}{N_p} = \frac{D\pi}{\varepsilon L^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (-1)^n (2n+1) \exp \left(- (n+0.5)^2 \pi^2 \frac{tD}{\varepsilon L^2} \right) \right\} \quad (10)$$

การวิเคราะห์หาพารามิเตอร์ของระบบในการทดลองแท่งโดยทั่วไปมักเริ่มจากการหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดชันของก๊าซก่อนค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา การทำการทดลองหาพารามิเตอร์ของระบบกรณีเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่งภายในปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนทำได้โดยฉีดก๊าซผสมระหว่างก๊าซเฉื่อย (Inert gas) และก๊าซทำปฏิกิริยา (Reactant gas) ไปยังปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนที่บรรจุอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาไว้เต็มทั้งปฏิกรณ์ ใ้คงตอบสนองของก๊าซเฉื่อยที่ได้ถูกนำมาวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดชันของก๊าซเฉื่อย จากสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดชันของก๊าซเฉื่อยที่ทราบค่าถูกนำไปคำนวณหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดชันของก๊าซทำปฏิกิริยาโดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 3 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาถูกหาหลังจากทราบค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดชันของก๊าซทำปฏิกิริยา

ลักษณะทางกายภาพของปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนที่บรรจุด้วยอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาทำให้ในทางปฏิบัติเป็นเรื่องยากที่จะรักษาอุณหภูมิภายในโซนตัวเร่งปฏิกิริยาให้มีความสม่ำเสมอทั่วทั้งโซน การลดความยาวของโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาให้สั้นลงและประกบด้วยโซนอนุภาคเฉื่อยจะสามารถทำให้อุณหภูมิภายในโซนตัวเร่งปฏิกิริยาสม่ำเสมอมากขึ้น ปฏิกรณ์ที่มีการบรรจุอนุภาคในลักษณะนี้เรียกว่าปฏิกรณ์แท่งสามโซน

แบบจำลองปฏิกรณ์แท่งสามโซน

ปฏิกรณ์แท่งสามโซนเป็นปฏิกรณ์ที่โซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาถูกประกบอยู่ระหว่างโซนของอนุภาคเฉื่อย ภาพร่างของปฏิกรณ์แท่งสามโซนเป็นดังภาพที่ 3



ภาพที่ 3 ภาพร่างปฏิกรณ์แท่งสามโซน

โซนที่หนึ่งและโซนที่สามเป็นโซนที่บรรจุด้วยของอนุภาคของแข็งเฉื่อยชนิดเดียวกัน เศษส่วนช่องว่างของอนุภาคในเบดและสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนทั้งสองนี้ถือว่ามีความเท่ากัน ปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในโซนอนุภาคเฉื่อยมีเพียงการแพร่ของก๊าซ สมการอนุรักษ์มวลของก๊าซใดๆเขียนได้ดังนี้

$$\text{โซนที่หนึ่งและโซนที่สาม :} \quad \varepsilon_{1,3} \frac{\partial C}{\partial t} = D_{1,3} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (11)$$

เมื่อ $D_{1,3}$ คือสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลักซ์ของก๊าซใดๆที่แพร่ผ่านโซนอนุภาคเฉื่อย (โซนที่หนึ่งหรือโซนที่สาม)(ตารางเมตรต่อวินาที) และ $\varepsilon_{1,3}$ คือเศษส่วนช่องว่างของอนุภาคเฉื่อยในโซนที่หนึ่งหรือโซนที่สาม

สำหรับโซนที่สองซึ่งเป็นโซนที่บรรจุอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา การฉีดก๊าซเฉื่อยผ่านไปยังโซนที่สองนี้ทำให้เกิดเพียงการแพร่ของก๊าซเพียงอย่างเดียว สมการอนุรักษ์มวลของก๊าซเฉื่อยผ่านเบดตัวเร่งปฏิกิริยาเขียนได้ดังนี้

$$\text{โซนที่สอง :} \quad \varepsilon_2 \frac{\partial C}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (12)$$

เมื่อ D_2 คือสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (โซนที่สอง)(ตารางเมตรต่อวินาที), ε_2 คือเศษส่วนช่องว่างอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาในโซนที่สอง

ในกรณีเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง การฉีดก๊าซทำปฏิกิริยาผ่านเข้าไปยังปฏิกรณ์แทปสามโซนทำให้เกิดปฏิกิริยาขึ้นในโซนที่สอง ส่วนในโซนที่หนึ่งและโซนที่สามเกิดเพียงการแพร่ของก๊าซ สมการอนุรักษ์มวลของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนที่สองแสดงได้ดังนี้

$$\varepsilon_2 \frac{\partial C}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - \varepsilon_2 kC \quad (13)$$

สภาวะเริ่มต้นและสภาวะขอบสำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนเหมือนกันกับที่ใช้ในปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ส่วนที่ตำแหน่งขอบของโซนที่ติดกันภายในปฏิกรณ์มีค่าความเข้มข้นและฟลักซ์เท่ากัน สมการทางคณิตศาสตร์ของสภาวะขอบภายในปฏิกรณ์แสดงได้ดังนี้

สภาวะขอบ ณ พิกัด z_1 ที่ขอบระหว่างโซนที่ 1 และโซนที่ 2:

$$C|_I = C|_{II} \quad (14)$$

$$-D_1 \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_I = -D_2 \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{II} \quad (15)$$

สภาวะขอบ ณ พิกัด z_2 ที่ขอบระหว่างโซนที่ 2 และโซนที่ 3:

$$C|_{II} = C|_{III} \quad (16)$$

$$-D_2 \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{II} = -D_3 \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{III} \quad (17)$$

อัตราการใช้ของก๊าซทำปฏิกิริยาเป็นดังนี้

$$F = -AD_3 \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_{z=L} \quad (18)$$

กรณีการเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง การหาพารามิเตอร์ของระบบในปฏิกรณ์แบบสามโซนปกติเริ่มจากการคิดก๊าซเฉื่อยผ่านไปยังปฏิกรณ์ที่บรรจุอนุภาคเฉื่อยเต็มทั้งปฏิกรณ์ คำนวณการตอบสนองของก๊าซเฉื่อยที่ได้ถูกนำไปแปลผลหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยสำหรับโซนอนุภาคเฉื่อย หลังจากนั้นทำการคิดก๊าซเฉื่อยผ่านไปยังปฏิกรณ์แบบสามโซน คำนวณการตอบสนองของก๊าซเฉื่อยที่ได้จากกรณีนี้ถูกนำไปแปลผลหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในโซนตัวเร่งปฏิกิริยา โดยที่สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อยเป็นค่าที่ทราบจากขั้นตอนก่อนหน้านี้แล้ว วิธีนี้เป็นการลดจำนวนพารามิเตอร์ที่ต้องหาจากคำตอบในแต่ละครั้ง สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อยและโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่ได้ถูกนำมาหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซทำปฏิกิริยาในแต่ละโซนโดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 3 ส่วนค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาหาได้จากการคิดก๊าซทำปฏิกิริยาผ่านปฏิกรณ์แบบสามโซนแล้วนำคำตอบของก๊าซทำปฏิกิริยาไปแปลผลโดยที่สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซทำปฏิกิริยาในแต่ละโซนถูกหามาแล้วก่อนหน้านี้แล้ว

สมการอนุรักษ์มวลของก๊าซสำหรับปรากฏการณ์ที่เกิดขึ้นในปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซนและสามโซนที่แสดงข้างต้นเป็นแบบมีมิติ เพื่อเป็นการลดจำนวนตัวแปรของระบบน้อยลงในงานวิจัยนี้ จึงใช้สมการอนุรักษ์มวลของก๊าซในรูปของตัวแปรไร้มิติ (Dimensionless variables)

แบบจำลองไร้มิติสำหรับปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซน

สมการอนุรักษ์มวลแบบไร้มิติสำหรับปรากฏการณ์ต่างๆ ที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซน (Gleaves et al., 1997) สามารถเขียนได้ดังนี้

กรณีที่มีเพียงการแพร่เพียงอย่างเดียว
$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} \quad (19)$$

กรณีเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง
$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} - k^* C^* \quad (20)$$

C^* คือ ความเข้มข้นไร้มิติของก๊าซ ($C^* \equiv \frac{C}{N_p/\varepsilon AL}$), k^* คือ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาไร้มิติ

($k^* \equiv \frac{k\varepsilon L^2}{D}$), τ คือ เวลาไร้มิติ ($\tau \equiv \frac{tD}{\varepsilon L^2}$) และ ξ คือ พิกัดระยะทางไร้มิติ ($\xi \equiv \frac{z}{L}$)

สภาวะเริ่มต้นและสภาวะขอบแบบไร้มิติแสดงได้ดังนี้

สภาวะเริ่มต้น: $\tau = 0, \quad C^* = \delta(\xi - 0^+) \quad (21)$

สภาวะขอบ: $\xi = 0, \quad \frac{\partial C^*}{\partial \xi} = 0 \quad (22)$

$\xi = 1, \quad C^* = 0 \quad (23)$

อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซเป็นตามสมการต่อไปนี้

$$F^* = -\left. \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \right|_{\xi=1} \quad (24)$$

เมื่อ F^* คือ อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ ($F^* \equiv \frac{F\varepsilon L^2}{N_p D}$)

ผลเฉลยอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซกรณีเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวแสดงได้ดังนี้

$$F^* = \pi \sum_{n=0}^{\infty} \left((-1)^n (2n+1) \exp\left(-(n+0.5)^2 \pi^2 \tau\right) \right) \quad (25)$$

การวิเคราะห์หาพารามิเตอร์วิธีหนึ่งที่มีการนำมาใช้คือการวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ของโค้ง อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ โมเมนต์อันดับต่างๆ ของโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของ ก๊าซถูกนิยามดังสมการนี้

$$M_i^* = \int_0^\infty F^* \tau^i d\tau \quad (26)$$

เมื่อ M_i^* คือ โมเมนต์อันดับที่ i ของโค้งตอบสนอง

โมเมนต์อันดับที่นิยมใช้นำมาวิเคราะห์ในการทดลองแทป คือ โมเมนต์อันดับศูนย์และ โมเมนต์อันดับหนึ่งของโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซ โมเมนต์อันดับศูนย์ของโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซมีค่าเท่ากับพื้นที่ใต้โค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซกับเวลาไร้มิติ ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนต์อันดับศูนย์ของอัตราการไหลขาออกกับค่าการแปลงผัน (Conversion; X) แสดงได้ดังนี้

โมเมนต์อันดับศูนย์:
$$M_0^* = \int_0^\infty F^* d\tau \quad (27)$$

การแปลงผัน:
$$X = 1 - M_0^* \quad (28)$$

อัตราส่วนระหว่างโมเมนต์อันดับหนึ่งและโมเมนต์อันดับศูนย์คือเวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ ภายในปฏิกรณ์ (Mean residence time; τ_{res}) กระบวนการที่มีการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์ แทปหนึ่งโซนมีค่า τ_{res} เท่ากับ 0.5

$$\frac{M_1^*}{M_0^*} = \tau_{res} = 0.5 \quad (29)$$

โดยที่ τ_{res} เป็นตามนิยามดังนี้

$$\tau_{res} \equiv \frac{t_{res} D}{\varepsilon L^2} \quad (30)$$

แบบจำลองไร้มิติของปฏิกรณ์แทปสามโซน

การเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในโซนที่หนึ่งและโซนที่สามภายในปฏิกรณ์แทปสามโซน มีการอนุรักษ์มวลแบบไร้มิติของก๊าซใดๆ (Gleaves *et al.*, 1997) ดังนี้

$$\text{โซนที่หนึ่งและโซนที่สาม:} \quad r_\varepsilon \frac{\partial C^*}{\partial \tau} = r_D \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} \quad (31)$$

เมื่อ C^* คือ ความเข้มข้นไร้มิติของก๊าซใดๆ ($C^* \equiv C/(N_p/\varepsilon_2 AL)$), r_ε คือ อัตราส่วนของเศษส่วนช่องว่างของอนุภาคในเบคอนุภาคเฉื่อยต่อเบคอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ($r_\varepsilon \equiv \varepsilon_{1,3}/\varepsilon_2$) r_D คือ อัตราส่วนของสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ($r_D \equiv D_{1,3}/D_2$), τ คือเวลาไร้มิติ ($\tau \equiv tD_2/\varepsilon_2 L^2$), ξ คือ พิกัดระยะทางไร้มิติตามแนวแกนปฏิกรณ์ ($\xi_i \equiv l_i/L$)

ส่วนการเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในโซนที่สอง สมการอนุรักษ์มวลแบบไร้มิติของก๊าซเฉื่อยเหมือนสมการอนุรักษ์มวลแบบไร้มิติกรณีที่เกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน (สมการที่ 19)

กรณีการเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่งในโซนที่สองของปฏิกรณ์แทปสามโซน สมการอนุรักษ์มวลแบบไร้มิติของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนที่สองเป็นดังนี้

$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} - k^* C^* \quad (32)$$

เมื่อ k^* คือ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาไร้มิติ ($k^* \equiv k\varepsilon_2 L^2/D_2$),

สภาวะเริ่มต้นและสภาวะขอบเหมือนในปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน ส่วนสภาวะขอบที่พิกัดภายในปฏิกรณ์เป็นดังนี้

$$\text{สภาวะขอบที่พิกัด } \xi_1: \quad C^*|_I = C^*|_{II} \quad (33)$$

$$-r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi}|_I = -\frac{\partial C^*}{\partial \xi}|_{II} \quad (34)$$

สภาวะขอบที่พิกัด ξ_2 :

$$C^*|_{II} = C^*|_{III} \quad (35)$$

$$-\frac{\partial C^*}{\partial \xi}|_{II} = -r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi}|_{III} \quad (36)$$

อัตราการผลิตออกไรมิตติของก๊าซเป็นดังนี้

$$F^* = -r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi}|_{\xi=1} \quad (37)$$

เมื่อ F^* คืออัตราการผลิตออกไรมิตติของก๊าซ $\left(F^* \equiv \frac{F \varepsilon_2 L^2}{N_p D_2} \right)$

โค้งตอบสนองที่ได้รับจากการทดลองแทบโดยทั่วไปแสดงอยู่ในรูปของความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการผลิตออกของก๊าซต่อจำนวนโมลของก๊าซที่เวลาต่างๆ กรณีที่ใช้ตัวแปรไร้มิติ โค้งตอบสนองดังกล่าวจึงแสดงในรูปความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการผลิตออกไรมิตติของก๊าซกับเวลาไร้มิติ พื้นที่ใต้โค้งอัตราการผลิตออกไรมิตติดังกล่าวมีค่าเท่ากับโมเมนต์อันดับศูนย์ของโค้งอัตราการผลิตออก นิพจน์เชิงโมเมนต์อันดับศูนย์ของโค้งอัตราการผลิตออกของก๊าซของปฏิกรณ์แท่งสามโซน (Gleaves *et al.*, 1997) เป็นดังสมการต่อไปนี้

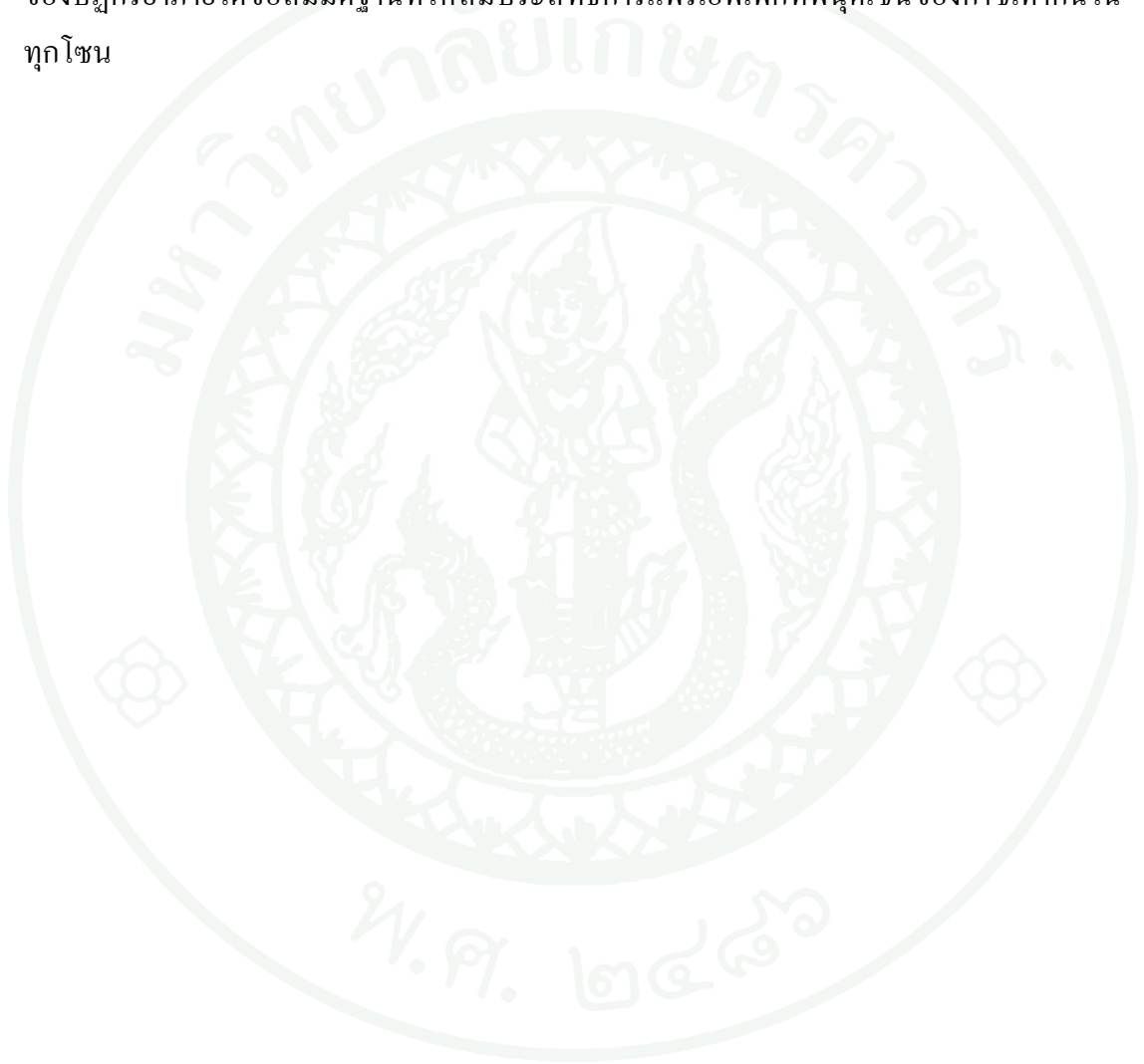
$$M_0^* = \frac{1}{\cosh \sqrt{\frac{k^* l_2^2}{L^2}} + \frac{l_3}{r_D l_2} \sqrt{\frac{k^* l_2^2}{L^2}} \sinh \sqrt{\frac{k^* l_2^2}{L^2}}} \quad (38)$$

เมื่อ l_i คือ ความยาวของโซนที่ i

กรณีที่เกิดเพียงการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แท่งสามโซนเวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ (Mean residence time; τ_{res}) มีค่าเท่ากับอัตราส่วนโมเมนต์อันดับหนึ่งต่อโมเมนต์อันดับศูนย์ของโค้งอัตราการผลิตออกของก๊าซ สมการที่ใช้คำนวณหาเวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์สำหรับปฏิกรณ์แท่งสามโซน (Phanawadee *et al.*, 1999) ถูกแสดงดังนี้

$$\frac{M_1^*}{M_0^*} = \tau_{res} = \frac{\xi_3}{r_D} \left[\frac{1}{2} \xi_3 r_\varepsilon + \xi_2 + \xi_1 r_\varepsilon \right] + \xi_2 \left[\frac{1}{2} \xi_2 + \xi_1 r_\varepsilon \right] + \frac{\xi_1}{r_D} \left[\frac{1}{2} \xi_1 r_\varepsilon \right] \quad (39)$$

นิพจน์โมเมนต์อันดับศูนย์ของสมการแทปสามโชนกรณีที่เกิดการแพร่เพียงอย่างเดียว (สมการที่ 39) และนิพจน์เวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยาแทปสามโชน (สมการที่ 38) จะนำไปใช้หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณของก๊าซและค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟพหุคูณของก๊าซเท่ากันในทุกโชน



อุปกรณ์และวิธีการ

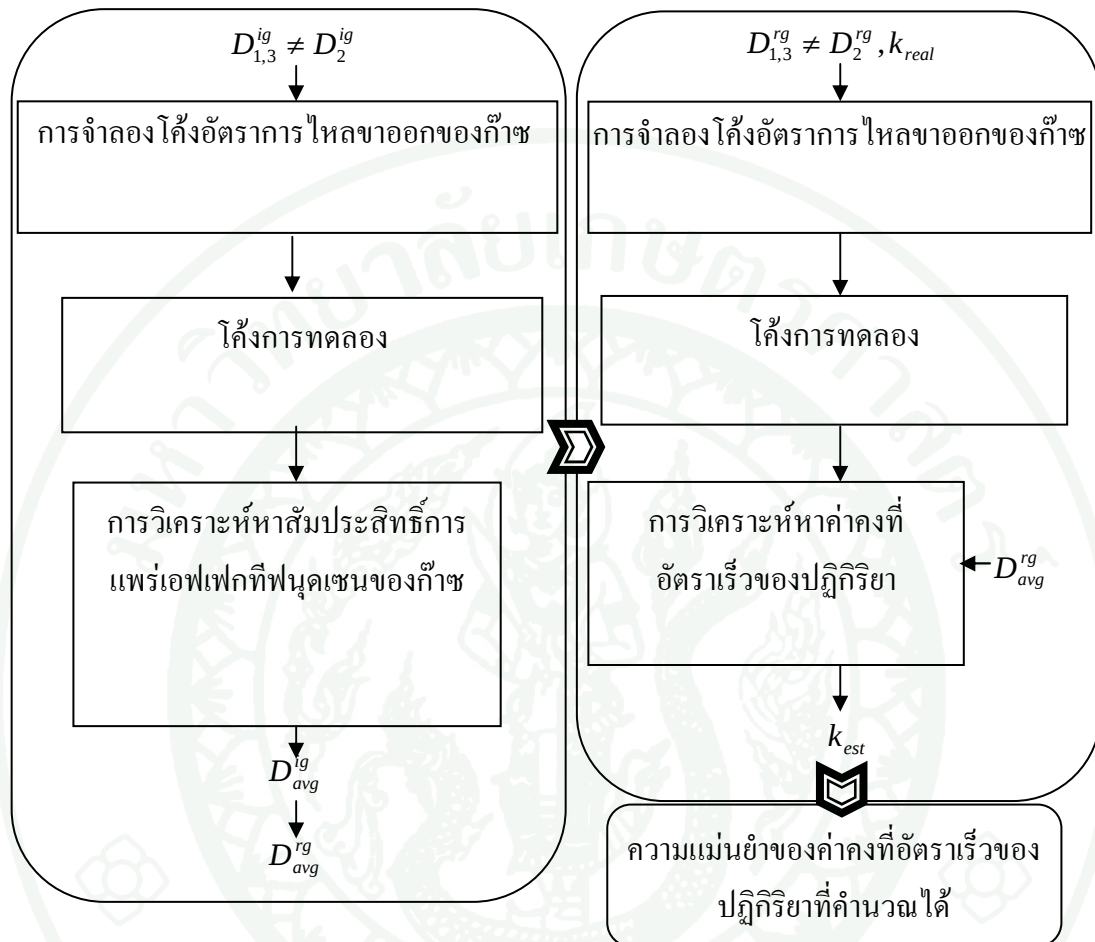
อุปกรณ์

1. เครื่องคอมพิวเตอร์
2. โปรแกรมได้จากเครือข่ายคอมพิวเตอร์สากล (Internet) ที่เผยแพร่โดย www.netlib.org ซึ่งประกอบด้วยเพิ่มโปรแกรมหลัก LSODA (Livermore solver for ordinary differential equation with automatic method switching for stiff and non-stiff problem) (Hindmarsh, 1972; Petzold and Hindmarsh, 1997) โปรแกรมนี้ถูกสร้างบนพื้นฐานของภาษาฟอร์แทรน 77 (Fortran 77) เพื่อใช้หาผลเฉลยของระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ (System of ordinary differential equation; ODEs)

วิธีการ

การวิเคราะห์หาความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนเริ่มจากการหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซจากกรณีที่มีเพียงการแพร่เพียงอย่างเดียว หลังจากนั้นจึงวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจากกรณีที่เกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง ขั้นตอนของการวิเคราะห์ถูกแสดงในภาพที่ 4 ขั้นตอนแรกเริ่มจากการจำลอง (Simulation) โค้งอัตราการผลิตออกของก๊าซซึ่งเป็นโค้งที่ใช้แทนโค้งการทดลองกรณีที่เกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซในเบคอนุภาคเฉลี่ยต่างกับเบคอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา การจำลองโค้งดังกล่าวทำโดยกำหนดสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซเฉลี่ยในโซนอนุภาคเฉลี่ยต่างกับโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ($D_{1,3}^{ig} \neq D_2^{ig}$) โค้งที่จำลองได้ดังกล่าวถูกเรียกให้เป็น “โค้งการทดลอง” หลังจากได้โค้งการทดลองแล้วขั้นตอนต่อไปเป็นส่วนของการวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซเท่ากันทุกโซน สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนของก๊าซที่วิเคราะห์ได้จากกรณีนี้เรียกว่า สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูคเซนเฉลี่ยของก๊าซเฉลี่ย (D_{avg}^{ig}) สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟก

ที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซเฉื่อยที่ได้ถูกนำไปหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซทำปฏิกิริยา (D_{avg}^{rg}) โดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 3



ภาพที่ 4 ขั้นตอนการวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ภายใต้สมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แบบสามโซน

หลังจากวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซแล้ว ขั้นตอนต่อมาเป็นส่วนของการหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจากกรณีการเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง กรณีนี้การจำลองโค้งอัตราการไหลขาออกเพื่อเป็นโค้งการทดลองทำโดยการกำหนดค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (Real rate constant; k_{real}) และสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉื่อยที่ต่างกับโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ($D_{1,3}^{rg} \neq D_2^{rg}$) โดยสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซทำปฏิกิริยาที่กำหนดในกรณีนี้มีค่าเท่ากับกรณี

ของก๊าซเฉื่อยที่กำหนดในกรณีก่อนหน้านี้ เนื่องจากการแปลงสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนของก๊าซเฉื่อยให้เป็นก๊าซทำปฏิกิริยาทั้งในโซนของอนุภาคเฉื่อยและโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาใช้ค่าเดียวกันคือค่าอัตราส่วนของกรณีที่สองของมวลโมเมกุลของก๊าซเฉื่อยต่อก๊าซทำปฏิกิริยา ไค้งที่จำลองได้จากกรณีนี้ถือเป็นไค้งการทดลองกรณีเกิดปฏิกิริยา ขั้นตอนต่อมาคือการนำไค้งการทดลองที่ได้มาวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (Estimated rate constant; k_{est}) กรณีที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนของก๊าซเท่ากันในทุกโซนของปฏิกรณ์แทปสามโซน โดยสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนของก๊าซที่นำมาใช้ก็คือสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซทำปฏิกิริยาที่หาได้จากขั้นที่แล้ว เมื่อวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาได้แล้วขั้นตอนสุดท้ายเป็นการหาความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้

การจำลองแบบ (Simulation) ทั้งหมดในงานวิจัยนี้ทำการหาผลเฉลยเชิงตัวเลขของไค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซของปฏิกรณ์แทปสามโซนซึ่งอาศัยระเบียบวิธี MOL (Method of lines) ซึ่งขั้นตอนการคำนวณใช้ระเบียบวิธี MOL อธิบายรายละเอียดในภาคผนวก ข

หลักการโดยรวมสำหรับการวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ถูกอธิบายไว้ดังข้างต้น ส่วนของรายละเอียดเกี่ยวกับวิธีการที่ใช้วิเคราะห์และสมการที่เกี่ยวข้องจะถูกอธิบายอย่างละเอียดดังต่อไปนี้

การวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซ

สำหรับวิธีวิเคราะห์ที่นำมาใช้หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซในงานวิจัยนี้มี 2 วิธีคือวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยที่อาศัยกำลังสองน้อยที่สุด (Least square) เป็นเกณฑ์ และวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ที่อาศัยการคำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ (Mean residence time; τ_{res}) ขึ้นตอนและสมการต่างๆ ที่ใช้ในการจำลองสำหรับการหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พุดเซนเฉลี่ยของก๊าซจากกรณีที่มีแพร่เพียงอย่างเดียวเป็นดังต่อไปนี้

1. วิธีการวิเคราะห์เชิงถดถอย

ปฏิกรณ์แทปสามโซนประกอบด้วยเบดสองชนิดคือเบดอนุภาคเฉื่อยและเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ชนิดของอนุภาคและขนาดของอนุภาคในเบดทั้งสองที่แตกต่างกันทำให้ก๊าซที่แพร่ผ่านเบดทั้งสองมีค่าแตกต่างกัน ดังนั้น โค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจากการทดลองกรณีเกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวในปฏิกรณ์แทปสามโซนจึงเป็น โค้งที่สัมพันธ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อย ($D_{1,3}^{ig}$) แตกต่างกับสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (D_2^{ig}) การจำลองโค้งทำได้โดยการกำหนดค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อยต่างกับโซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ($D_{1,3}^{ig} \neq D_2^{ig}$) โค้งที่จำลองขึ้นนี้เรียกว่า“โค้งการทดลอง” โค้งการทดลองดังกล่าวถูกนำไปทำการเทียบกับ“โค้งแบบจำลอง” (Model response) ซึ่งจำลองขึ้นภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเท่ากันทุกโซน เกณฑ์ที่ใช้ในการเทียบโค้งทั้งสองคือกำลังสองน้อยที่สุด (Least square) สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเฉื่อยที่ได้จากโค้งแบบจำลองเรียกว่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนเฉลี่ยของก๊าซเฉื่อย (D_{avg}^{ig}) D_{avg}^{ig} ที่วิเคราะห์ได้หาคำนามาเทียบกับ D_2^{ig} เป็นอัตราส่วนสามารถเขียนได้ในรูปของอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนเฉลี่ยของก๊าซต่อสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (d_D) เขียนได้ดังนี้

$$d_D = \frac{D_{avg}^{ig}}{D_2^{ig}} \quad (40)$$

ค่า d_D ที่คำนวณได้จากกรณีนี้เป็นของก๊าซเฉื่อย แต่สามารถใช้ได้กับก๊าซทำปฏิกิริยา เนื่องจากการเปลี่ยนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเฉื่อยไปเป็นก๊าซทำปฏิกิริยาทำได้โดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 3 คือนำสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซเฉื่อยคูณอัตราส่วนของมวลโมเลกุลของก๊าซเฉื่อยต่อก๊าซทำปฏิกิริยา เมื่อกรณีศึกษาเป็นกรณีที่อุณหภูมิของระบบที่ทำการทดลองมีค่าเท่ากัน ความสัมพันธ์ดังกล่าวแสดงได้ดังต่อไปนี้

$$d_D = \frac{D_{avg}^{ig} \sqrt{MW_{ig}/MW_{rg}}}{D_2^{ig} \sqrt{MW_{ig}/MW_{rg}}} = \frac{D_{avg}^{rg}}{D_2^{rg}} \quad (41)$$

จากสมการที่ 41 แสดงให้เห็นว่าอัตราส่วนของมวลโมเลกุลของก๊าซเฉื่อยต่อก๊าซทำปฏิกิริยาที่ตำแหน่งเศษมีค่าเท่ากับที่ตำแหน่งส่วน จึงทำให้ d_D ของก๊าซเฉื่อยเท่ากับของก๊าซทำปฏิกิริยา

โค้งแบบจำลองเป็นโค้งที่สัมพันธ์การแพร่แฟฟเฟกทีฟของก๊าซเท่ากันทุกโซน ซึ่งเปรียบเหมือนโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซสำหรับปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน สมการที่ 10 เป็นสมการที่ใช้สำหรับคำนวณหาอัตราการไหลขาออกของก๊าซต่อจำนวน โมลของก๊าซของปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน สำหรับกรณีที่สัมพันธ์การแพร่แฟฟเฟกทีฟของก๊าซที่ใช้เป็นสัมประสิทธิ์การแพร่เฉลี่ยของก๊าซสมการจะเป็นดังนี้

$$\frac{F}{N_p} = \frac{D_{avg}^{ig} \pi}{\varepsilon L^2} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (-1)^n (2n+1) \exp \left(-(n+0.5)^2 \pi^2 \frac{t D_{avg}^{ig}}{\varepsilon L^2} \right) \right\} \quad (42)$$

เพื่อเป็นการลดจำนวนตัวแปรของระบบให้น้อยลง การจำลองแบบในงานวิจัยนี้จึงอาศัยตัวแปรไร้มิติในการจำลอง ดังนั้นการจำลองโค้งการทดลองที่ต้องมีการกำหนดค่าสัมประสิทธิ์การแพร่แฟฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อยให้แตกต่างกับโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา โค้งการทดลองแบบไร้มิติจะเป็นการกำหนดค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่แฟฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (r_D) ที่ไม่เท่ากับหนึ่ง ส่วนโค้งแบบจำลองกรณีใช้ตัวแปรไร้มิติถูกจำลองขึ้น โดยใช้สมการอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ใช้คำนวณสามารถแสดงได้ดังนี้

$$F^* = d_D \pi \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (-1)^n (2n+1) \exp \left(-(n+0.5)^2 \pi^2 d_1 \tau \right) \right\} \quad (43)$$

วิธีการข้างต้นเป็นการวิเคราะห์เชิงลดถอยซึ่งเป็นการเทียบโค้ง สำหรับการวิเคราะห์อีกแบบหนึ่งคือวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ซึ่งเป็นวิธีที่ใช้การคำนวณโดยอาศัยนิพจน์เชิงโมเมนต์ต่างๆ ในการคำนวณ

2. วิเคราะห์เชิงโมเมนต์

กรณีที่มีการแพร่ของก๊าซเพียงอย่างเดียวเกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์สามารถคำนวณหาค่าเวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ (Mean residence time; τ_{res}) ได้ตามสมการดังต่อไปนี้

$$\tau_{res} = \frac{\xi_3}{r_D} \left[\frac{1}{2} \xi_3 r_\varepsilon + \xi_2 + \xi_1 r_\varepsilon \right] + \xi_2 \left[\frac{1}{2} \xi_2 + \xi_1 r_\varepsilon \right] + \frac{\xi_1}{r_D} \left[\frac{1}{2} \xi_1 r_\varepsilon \right] \quad (44)$$

เนื่องจากอนุภาคของแข็งที่ใช้ในงานวิจัยนี้เป็นทรงกลมทั้งในโซนอนุภาคเฉื่อยและโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่ง ε ของอนุภาคของแข็งทรงกลมมีค่าเท่ากับ 0.36 ดังนั้น r_ε ที่ใช้ในงานวิจัยนี้จึงมีค่าเท่ากับ 1

จากนิยามของ τ_{res} ในสมการที่ 30 หากนำมาใช้สำหรับกรณีนี้สามารถเขียนได้ดังนี้

$$\tau_{res} = \frac{t_{res} D_2}{\varepsilon_2 L^2} \quad (45)$$

τ_{res} ที่คำนวณได้ถือเป็นค่าเวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์ที่ได้จากการทดลอง ($\tau_{res,exp}$) ดังนั้นนิพจน์ของ $\tau_{res,exp}$ เป็นดังนี้

$$\tau_{res,exp} = \frac{t_{res,exp} D_2}{\varepsilon_2 L^2} \quad (46)$$

ค่า $\tau_{res,exp}$ ที่คำนวณได้ถูกนำไปใช้คำนวณหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยสำหรับกรณีที่ทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซนมีสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเท่ากัน สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซดังกล่าวจึงเป็นสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อย (D_{avg}^g) การแพร่ของก๊าซเฉื่อยภายในปฏิกรณ์แทปสามโซนที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซเฉื่อยในทุกโซนเปรียบเสมือนเป็นการแพร่ในปฏิกรณ์แทปหนึ่งโซน เวลาเฉลี่ยไว้มิติของก๊าซที่อยู่ในปฏิกรณ์สำหรับปฏิกรณ์

แท่งหนึ่งโซนมีค่าเท่ากับ 0.5 (สมการที่ 29) (Gleaves *et al.*, 1997, Phanawadee. P., *et al.*, 1999) สำหรับกรณีนี้นิพจน์เวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์เป็นดังนี้

$$0.5 = \frac{t_{res,exp} D_{avg}^{ig}}{\varepsilon_2 L^2} \quad (47)$$

และจากนิยามค่า d_D ในสมการที่ 42 และ 48 สามารถพิสูจน์ได้ว่า

$$d_D = \frac{D_{avg}^{ig}}{D_2^{ig}} = \frac{D_{avg}^{rg}}{D_2^{rg}} = \frac{0.5}{\tau_{res,exp}} \quad (48)$$

หลังจากทราบค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซซึ่งอยู่ในรูปอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซต่อสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (d_D) แล้ว ขั้นตอนต่อไปเป็นการหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยากรณีที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซที่ได้มาในทุกโซนภายในปฏิกรณ์แท่งสามโซน และสุดท้ายคือการวิเคราะห์หาความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้

การวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่หาได้

การจำลองโคงการทดลองทำได้โดยการกำหนดค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉลี่ยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาไม่เท่ากับหนึ่ง ($r_D \neq 1$) และกำหนดค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{real}^*) ในโซนที่สอง โคงการทดลองดังกล่าวจะถูกนำไปวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของการไหลขาออกของก๊าซ (k_{est}^*) เมื่ออยู่ในข้อสมมติฐานที่สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณของก๊าซทำปฏิกิริยาเท่ากันทุกโซนโดยใช้ d_D ที่หาได้จากกรณีที่มีการแพร่เพียงอย่างเดียว วิธีวิเคราะห์ที่นำมาใช้คือวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยและวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์

1. วิธีวิเคราะห์เชิงทดลอง

วิธีวิเคราะห์เชิงทดลองเป็นวิธีที่อาศัยการเทียบโค้งระหว่างโค้งการทดลองมาเทียบกับโค้งแบบจำลอง โดยอาศัยกำลังสองน้อยที่สุดเป็นเกณฑ์ รูปแบบของโค้งที่นำมาเทียบในงานวิจัยนี้มี 2 แบบ แบบแรกคือโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ แบบที่สองเป็นโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอร์มัลไลซ์ (Normalize) พื้นที่ใต้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง ความแตกต่างของวิธีการเทียบโค้งสองวิธีนี้คือ การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซต้องนำโค้งการทดลองไปทำการสอบเทียบ (Calibration) กับโค้งมาตรฐานซึ่งโดยปกติใช้โค้งตอบสนองของก๊าซเฉื่อยเป็นโค้งมาตรฐาน การเทียบโค้งในลักษณะนี้จึงมีความยุ่งยาก ส่วนการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอร์มัลไลซ์ไม่จำเป็นต้องทำการสอบเทียบ (P.Tentak, *et al* 2007)

1.1 การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ (Dimensionless exit flow rate curve fitting)

การเทียบโค้งกรณีนี้เป็นการเทียบระหว่างโค้งการทดลองและโค้งแบบจำลองโดยรูปแบบของโค้งที่นำมาเทียบกันคือโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ (Dimensionless exit flow) โค้งการทดลองสำหรับการเกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่งถูกจำลองขึ้นโดยกำหนดค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{real}^*) ในโซนตัวเร่งปฏิกิริยาและค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาไม่เท่ากับหนึ่ง ($r_D \neq 1$) โดยที่มีค่าเป็นค่าเดียวกับกรณีที่มีเพียงการแพร่ก่อนหน้านี้ โค้งการทดลองที่จำลองได้จะถูกนำมาเทียบกับ “โค้งแบบจำลอง” ที่จำลองขึ้นภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาเท่ากันทุกโซนในปฏิกรณ์แทปสามโซน การเทียบโค้งใช้กำลังสองน้อยที่สุดเป็นเกณฑ์จากการเทียบทำให้ทราบค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{est}^*)

ค่าความแตกต่างระหว่างค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจริง (k_{real}^*) กับค่าที่คำนวณได้ (k_{est}^*) ถูกใช้เป็นเกณฑ์บอกความแม่นยำของข้อสมมติฐานที่กำหนดให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาเท่ากันทุกโซน ซึ่งความสัมพันธ์แสดงได้ดังสมการนี้

$$\Delta k^* = \frac{k_{est}^* - k_{real}^*}{k_{real}^*} \quad (49)$$

1.2 การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง (Unit area normalized dimensionless exit flow rate curve fitting)

ทำนองเดียวกันกับวิธีเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ โค้งการทดลองเป็นโค้งที่จำลองขึ้นโดยการกำหนดค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{real}^*) และค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนของอนุภาคเฉื่อยต่อโซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีค่าไม่เท่ากับหนึ่ง ($r_D \neq 1$) และเท่ากับกรณีที่มีเพียงการแพร่ กรณีที่เกิดปฏิกิริยาแบบไม่ผันกลับอันดับหนึ่งพื้นที่ได้โค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซไม่เท่ากับหนึ่ง ก่อนนำโค้งการทดลองนี้ไปทำการเทียบต้องทำการนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งการทดลองให้เท่ากับหนึ่งก่อนแล้วจึงนำไปทำการเทียบโค้งกับโค้งแบบจำลองที่ถูกนอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้โค้งเท่ากับหนึ่งเช่นกัน ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{est}^*) จากโค้งแบบจำลองที่ได้ถูกนำไปคำนวณหาความแม่นยำโดยอาศัยความสัมพันธ์ดังสมการที่ 50

สำหรับสองวิธีข้างต้นเป็นการวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาโดยใช้วิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย วิธีวิเคราะห์อีกวิธีหนึ่งคือวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์

2. วิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์

การวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาโดยวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์นี้อาศัยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ (Conversion expression) ขั้นตอนการคำนวณเริ่มจากการหาค่าการแปลงผันของก๊าซ (Conversion, X) จากการทดลองที่จำลองให้มีสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉื่อยแตกต่างกับสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา และการเกิดปฏิกิริยาในโซนที่สอง การคำนวณค่าการแปลงผันของก๊าซจากการจำลองเริ่มจากการกำหนดค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{real}^*) ที่เกิดขึ้นในโซนที่สองและค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่เหมือนกับที่ใช้ในกรณีที่มีเพียงการแพร่ จากค่าที่กำหนดถูกนำมาคำนวณหาค่าการแปลงผันของก๊าซโดยใช้นิพจน์การแปลงผันของปฏิกิริยาแบบสามโซน ตามสมการดังนี้

$$X = 1 - M_0^* = 1 - \frac{1}{\cosh \sqrt{\frac{k_{real}^* l_2^2}{L^2}} + \frac{l_3}{r_D l_2} \sqrt{\frac{k_{real}^* l_2^2}{L^2}} \sinh \sqrt{\frac{k_{real}^* l_2^2}{L^2}}} \quad (50)$$

การแปลงผันของก๊าซที่คำนวณจากสมการที่ (50) ถือว่าเป็นค่าการแปลงผันที่ได้จากการทดลอง ค่าการแปลงผันของก๊าซที่เท่ากันถูกนำมาคำนวณหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{est}^*) เมื่อมีการใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในทุกระยะของปฏิกิริยาแบบสามโซน ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในรูปตัวแปรไร้มิติคือค่า d_D ที่คำนวณได้จากกรณีการแพร่เพียงอย่างเดียว

$$X = 1 - M_0^* = 1 - \frac{1}{\cosh \sqrt{\frac{k_{est}^* l_2^2}{d_D L^2}} + \frac{l_3}{l_2} \sqrt{\frac{k_{est}^* l_2^2}{d_D L^2}} \sinh \sqrt{\frac{k_{est}^* l_2^2}{d_D L^2}}} \quad (51)$$

ค่า d_D คือค่าที่ทราบแล้วจากขั้นตอนก่อนหน้านี้ หลังจากได้ค่า k_{est}^* แล้วขั้นตอนต่อไปเป็นการนำค่า k_{est}^* ที่คำนวณได้มาหาความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาโดยใช้สมการที่

ผลและวิจารณ์

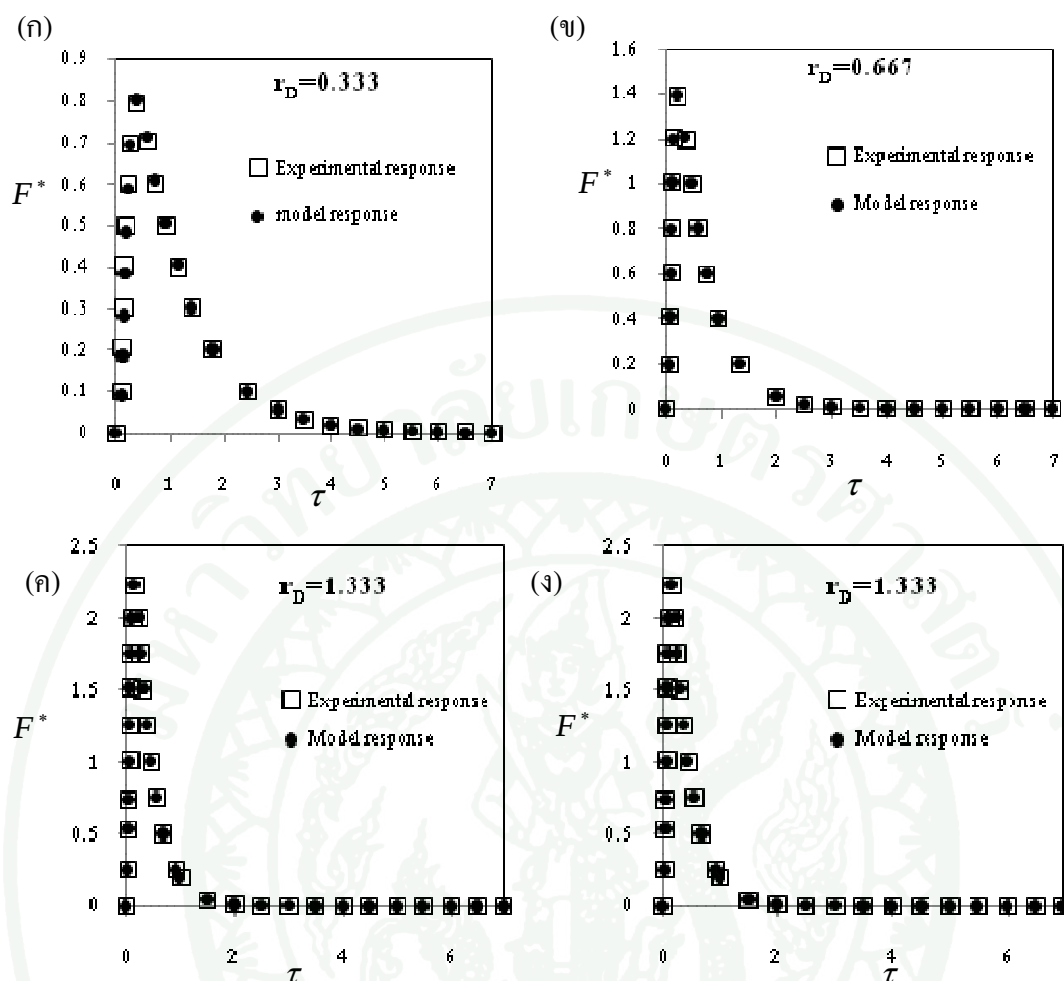
การแสดงผลลัพธ์ของงานวิจัยนี้จะเริ่มจากการแสดงผลการวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูตเซนเฉลี่ยของก๊าซก่อน หลังจากนั้นเป็นการเสนอผลของความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้

การวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูตเซนเฉลี่ยของก๊าซ

ผลลัพธ์ส่วนแรกที่ถูกนำเสนอเป็นส่วนของการวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกที่ฟลูตเซนเฉลี่ยของก๊าซทั้งจากวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยและวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ สำหรับวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยซึ่งเป็นวิธีที่นำโคงการทดลองมาเทียบกับโคงแบบจำลอง ผลการเทียบโคงอัตรา

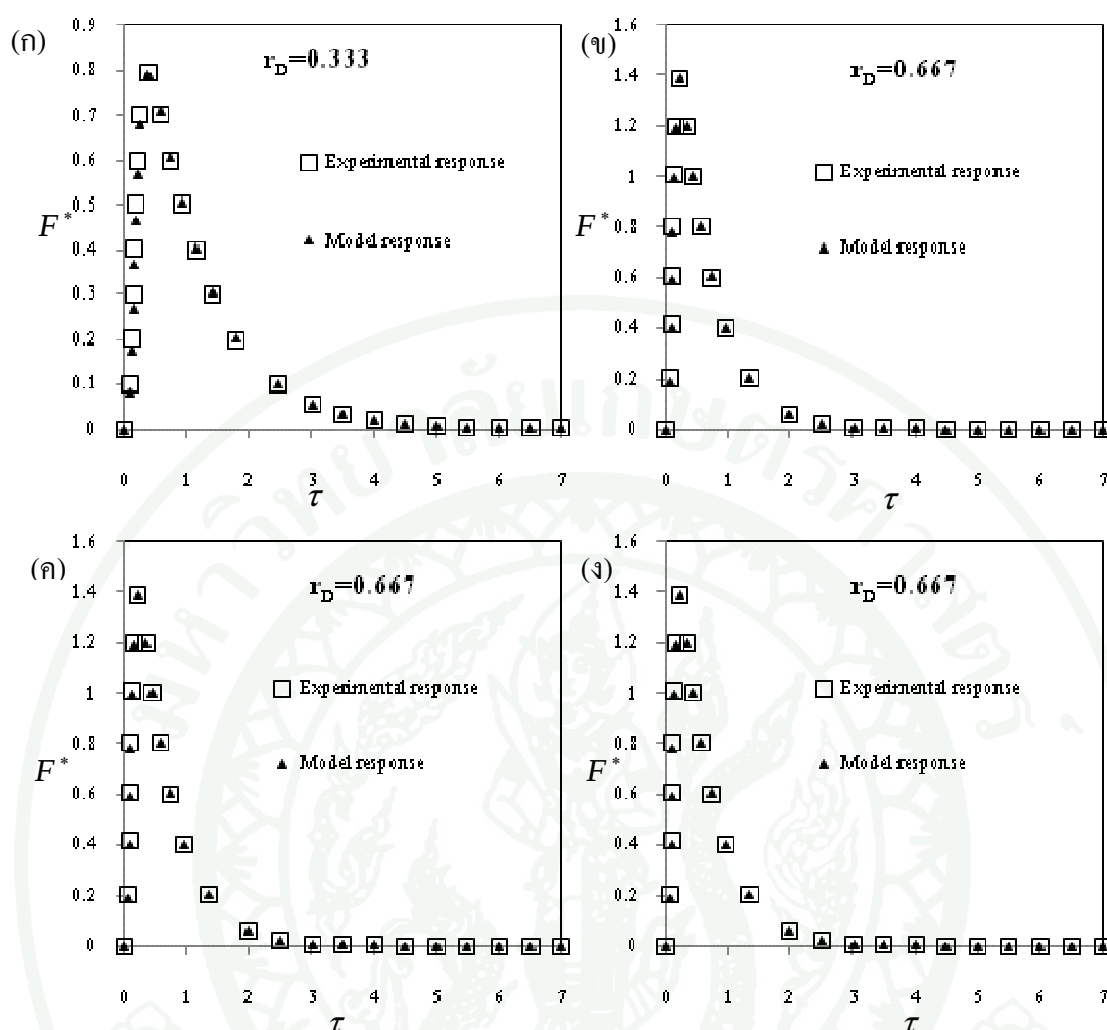
การไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโคงการทดลอง ($\square$) และโคงแบบจำลอง ($\bullet$) กรณีที่ค่า r_D เท่ากับ 0.333 (ก) 0.667 (ข) 1.333 (ค) และ 3.000 (ง) สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีอัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (L_2/L) เท่ากับ $1/3$ ถูกแสดงในภาพที่ 5 ผลการเปรียบเทียบแสดงให้เห็นว่าอัตราไหลขาออกไร้มิติของก๊าซในทุกตำแหน่งเวลาของโคงการทดลองและโคงแบบจำลองจะแตกต่างกันน้อยเมื่อค่า r_D มีค่าใกล้เคียงหนึ่ง ซึ่งในภาพคือกรณีที่ r_D เท่ากับ 0.667 (รูปข.) และ 1.333 (รูปค.)

พิจารณาลักษณะความกว้างของโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซทั้งสี่ค่า r_D ที่แสดงในภาพที่ 5 แสดงให้เห็นว่าโคงอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ค่า r_D สูงกว่า กรณีที่ r_D มากกว่าแสดงว่าก๊าซแพร่ในโซนอนุภาคเฉื่อยได้เร็วกว่า เมื่อก๊าซแพร่ได้เร็วกว่าเวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ในปฏิกรณ์จึงสั้นกว่า โคงจึงมีลักษณะแคบกว่า



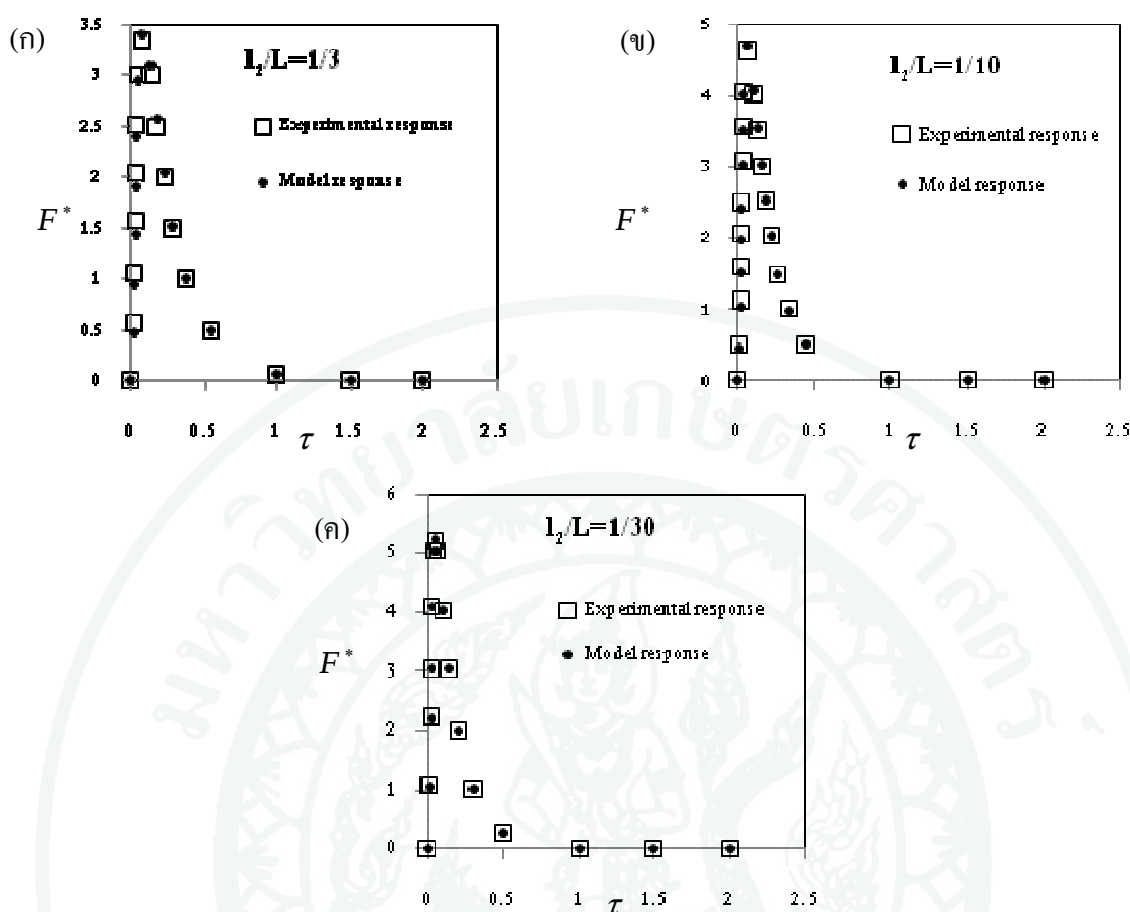
ภาพที่ 5 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการใช้พลังงานไฟฟ้าของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง ($\square$) กับ โค้งแบบจำลอง ($\bullet$) กรณีวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย กรณีที่มี r_D เท่ากับ 0.333(ก), 0.667(ข), 1.333(ค) และ 3.000(ง) สำหรับปฏิกรณ์แบบที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3

สำหรับการวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซอีกวิธีหนึ่ง คือวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ซึ่งเป็นวิธีที่อาศัยนิพจน์เวลาเฉลี่ยที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์มาใช้คำนวณ วิธีนี้ไม่จำเป็นต้องมีการเทียบโค้งในขั้นตอนการคำนวณหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่พหุคูณเฉลี่ยของก๊าซหรือค่า d_D อย่างไรก็ตาม โค้งแบบจำลองสามารถถูกสร้างขึ้นจากค่า d_D ที่คำนวณได้ และถูกเปรียบเทียบกับโค้งการทดลองได้ด้วย



ภาพที่ 6 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไรมิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง ($\square$) กับ โค้งแบบจำลอง ($\blacktriangle$) โดยใช้นิพจน์เวลาเฉลี่ยไรมิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ กรณีที่ค่า r_D เท่ากับ 0.333(ก), 0.667(ข), 1.333(ค) และ 3.000(ง) สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/3$

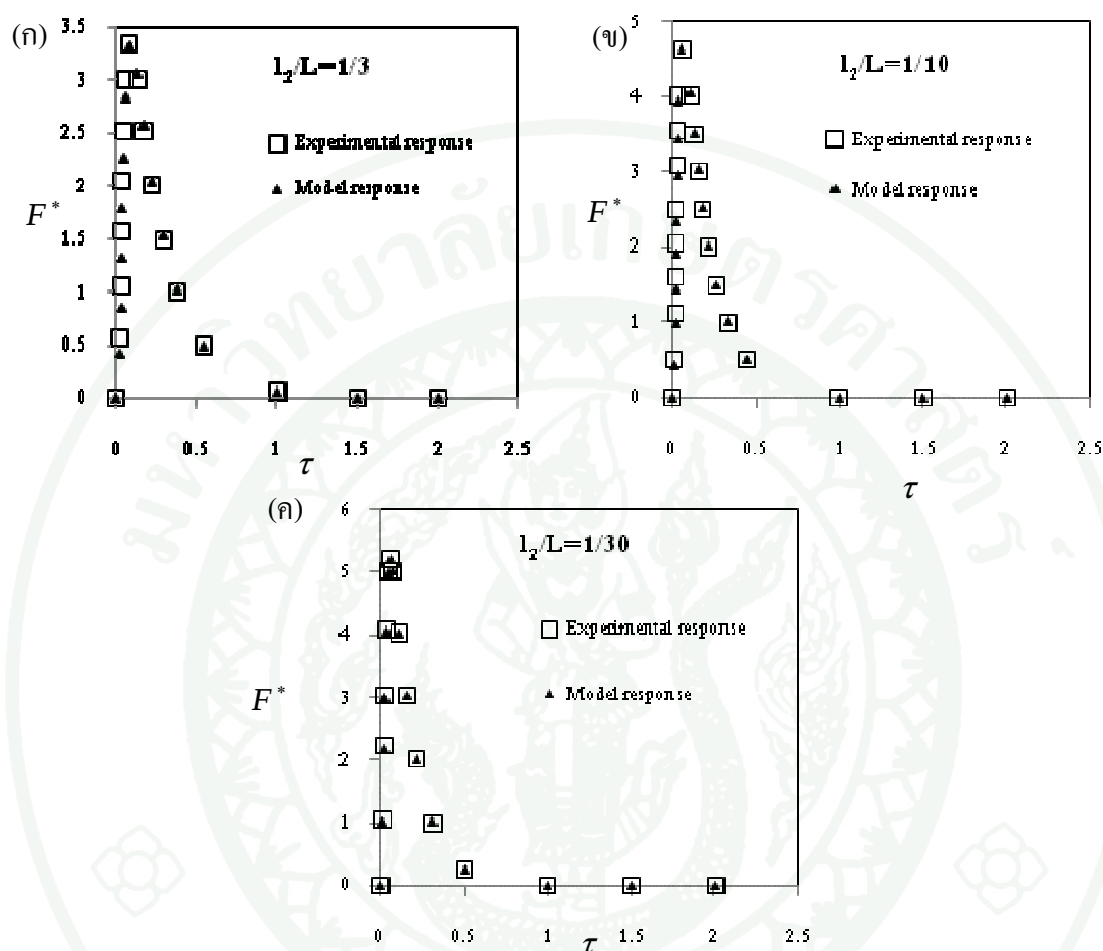
ภาพที่ 6 แสดงการเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไรมิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง ($\square$) และ โค้งแบบจำลอง ($\blacktriangle$) กรณีที่ใช้นิพจน์เวลาเฉลี่ยไรมิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ที่ค่า r_D เท่ากับ 0.333(ก), 0.667(ข), 1.333(ค) และ 3.000(ง) สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีอัตราส่วนความยาวของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (l_2/L) เท่ากับ $1/3$ ผลการเปรียบเทียบมีลักษณะเช่นเดียวกับกรณีที่ใช้วิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยคือกรณีที่ r_D ใกล้เคียงหนึ่งค่าอัตราการไหลขาออกไรมิติของก๊าซที่ตำแหน่งเวลาเดียวกันมีความแตกต่างของค่าอัตราการไหลขาออกของก๊าซต่างกันน้อยลง และที่ r_D มากขึ้นขนาดของโค้งมีลักษณะแคบลงเช่นเดียวกัน



ภาพที่ 7 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับ โค้งแบบจำลอง (●) กรณีวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิง عدد ที่ r_D เท่ากับ 3.000 กรณีที่ l_2/L เป็น 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค)

ภาพที่ 7 แสดงการเปรียบเทียบโค้งอัตราไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง (□) กับโค้งแบบจำลอง (●) กรณีวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิง عدد ที่ r_D เท่ากับ 3.000 กรณีที่ l_2/L เป็น 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค) ผลการเปรียบเทียบแสดงให้เห็นว่าเมื่อความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาสั้นลงคือกรณีที่ l_2/L ลดลง โค้งทั้งสองมีการซ้อนทับกันมากขึ้น สังเกตจากกรณีที่ l_2/L เท่ากับ 1/3 การซ้อนทับกันของอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซจากสองวิธีที่ตำแหน่งเวลาเดียวกันมีความแตกต่างกันมากกว่าที่ l_2/L เท่ากับ 1/10 และ 1/30 การที่อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซกรณีที่ความยาวของเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาสั้นกว่ามีการซ้อนทับกันมากกว่ากรณีที่ความยาวเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยายาวกว่าเนื่องจากอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟฟิสิกส์ของก๊าซต่อสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟฟิสิกส์ของก๊าซในโซนอนุภาคตัวเร่ง

ปฏิกิริยา (d_D) ที่ใช้คำนวณในโค้งแบบจำลองมีค่าใกล้เคียงกับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่
เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคเหลือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (r_D)



ภาพที่ 8 การเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง ($\square$) กับ โค้งแบบจำลอง ($\blacktriangle$) ซึ่งคำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกิริยาที่ r_D เท่ากับ 3.000 สำหรับปฏิกิริยาแบบสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค)

ภาพที่ 8 แสดงการเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซระหว่างโค้งการทดลอง ($\square$) กับโค้งแบบจำลอง ($\blacktriangle$) ซึ่งคำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยไร้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกิริยาที่ r_D เท่ากับ 3.000 สำหรับปฏิกิริยาแบบสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ 1/3(ก), 1/10 (ข) และ 1/30 (ค) ผลการเปรียบเทียบแสดงให้เห็นว่าเมื่อค่า L_2/L ลดลงหรือความยาวเบดของตัวเร่งปฏิกิริยาลดลง

อัตราการใช้พลังงานของก๊าซจากโคงการทดลองและโคงแบบจำลองซึ่งเทียบที่เวลาไว้มีค่าเดียวกัน มีความแตกต่างกันน้อยลงทำนองเดียวกับกรณีทวิเคราะห์เชิงทดลอง

ผลลัพธ์ค่า d_D ที่วิเคราะห์ภายใต้ความเชื่อมั่น 95% ถูกนำเสนอพร้อมกับค่าผลบวกของความเบี่ยงเบนกำลังสอง (Sum of squares; SS) แสดงในตารางที่ 1

ตารางที่ 1 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่แฟฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อย ต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แบบสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ 1/3 กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงทดลอง

r_D	d_D	SS
0.333	$0.4342 \pm 1.669 \times 10^{-4}$	0.090032
0.500	$0.6052 \pm 1.118 \times 10^{-4}$	0.028985
0.667	$0.7544 \pm 5.400 \times 10^{-5}$	0.00543
1.333	$1.2052 \pm 4.797 \times 10^{-5}$	0.002682
1.500	$1.2932 \pm 1.069 \times 10^{-4}$	0.01413
2.000	$1.5169 \pm 3.885 \times 10^{-4}$	0.13977
3.000	$1.8433 \pm 1.219 \times 10^{-3}$	1.1331

ตารางที่ 1 แสดงค่า d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่แฟฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แบบสามโซนที่มี L_2/L เท่ากับ 1/3 กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงทดลอง ผลจากการคำนวณแสดงให้เห็นว่า d_D มีแนวโน้มเดียวกับค่า r_D คือเมื่อ r_D น้อยกว่าหนึ่ง ค่า d_D ที่วิเคราะห์ได้ก็มีค่าน้อยกว่าหนึ่ง และที่ r_D มากกว่าหนึ่งค่า d_D ที่คำนวณได้ค่ามากกว่าหนึ่ง พิจารณาข้อมูลในตารางสังเกตได้ว่าที่ r_D ใกล้เคียงหนึ่งคือที่ r_D เท่ากับ 0.667 และ 1.333 ค่า d_D ที่คำนวณได้มีช่วงความเชื่อมั่นแคบกว่า และผลบวกของความเบี่ยงเบนกำลังสองน้อยกว่า (SS) กรณีที่ r_D ห่างจากหนึ่ง การเทียบโคงที่มีช่วงความเชื่อมั่นแคบและผลบวกของความเบี่ยงเบนกำลังสองต่ำหมายถึงว่าการเทียบครั้งนั้นมีการซ้อนทับกันของโคงดีกว่า ดังที่เห็นการเทียบโคงที่แสดงในภาพที่ 5

สำหรับข้อมูลในตารางที่ 1 เป็นผลลัพธ์กรณีที่ใช้ปฏิกรณ์แบบสามโซนมี l_2/L เท่ากับ $1/3$ ส่วนกรณีที่มี l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/30$ ผลลัพธ์ของค่า d_D ที่คำนวณได้ถูกแสดงดังตารางที่ 2 และ 3 ตามลำดับ

ตารางที่ 2 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อย ต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แบบสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/10$ กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย

r_D	d_D	SS
0.333	$0.3584 \pm 1.877 \times 10^{-5}$	0.001379
0.500	$0.5284 \pm 1.495 \times 10^{-5}$	0.000594
0.667	$0.6925 \pm 8.600 \times 10^{-6}$	0.000143
1.333	$1.2946 \pm 1.151 \times 10^{-5}$	0.000144
1.500	$1.4340 \pm 2.867 \times 10^{-5}$	0.000805
2.000	$1.8274 \pm 1.345 \times 10^{-4}$	0.013912
3.000	$2.5236 \pm 6.126 \times 10^{-4}$	0.20896

ตารางที่ 3 d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อย ต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แบบสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/30$ กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย

r_D	d_D	SS
0.333	$0.3418 \pm 2.245 \times 10^{-6}$	2.070×10^{-5}
0.500	$0.5102 \pm 1.852 \times 10^{-6}$	9.440×10^{-6}
0.667	$0.6768 \pm 1.045 \times 10^{-6}$	2.270×10^{-6}
1.333	$1.3228 \pm 1.382 \times 10^{-6}$	2.030×10^{-6}
1.500	$1.4804 \pm 3.969 \times 10^{-6}$	1.4900×10^{-5}
2.000	$1.9424 \pm 2.218 \times 10^{-5}$	0.000356
3.000	$2.8243 \pm 1.235 \times 10^{-4}$	0.000759

ตารางที่ 2 และ 3 แสดงค่า d_D ที่อัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่แฟฟเฟกที่พหุคูณของก๊าซในโชนอนุภาคเหลือต่อโชนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโชนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/30$ ตามลำดับ กรณีการวิเคราะห์โดยวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย ผลของค่า d_D ที่วิเคราะห์ได้จากวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยกรณีที่ปฏิกรณ์แทปสามโชนมีค่า l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/30$ ในตารางที่ 2 และ 3 ตามลำดับให้ผลเช่นเดียวกับกรณีที่ l_2/L เท่ากับ $1/3$ คือกรณีที่ r_D น้อยกว่าหนึ่ง (r_D เท่ากับ 0.333, 0.500 และ 0.667) ค่า d_D ที่คำนวณได้มีค่าน้อยกว่าหนึ่ง ส่วนที่ r_D มากกว่าหนึ่ง (r_D เท่ากับ 1.333, 1.500, 2.000 และ 3.000) ค่า d_D ที่ได้มีค่ามากกว่าหนึ่ง แต่หากศึกษาค่า d_D กรณีที่ความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาลดลงต้องอาศัยค่า d_D จากทั้งสามตารางมาทำการเทียบกับ กรณีที่ค่า r_D เดียวกันแต่ความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยา (l_2) ลดลงคือที่อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (l_2/L) ลดลง ค่า d_D มีค่าใกล้เคียงค่า r_D มากขึ้นรวมถึงช่วงความเชื่อมั่นและผลบวกของความเบี่ยงเบนกำลังสองมีค่าลดลง ผลดังกล่าวสอดคล้องกับผลการเทียบโค้งในภาพที่ 7 คือเมื่อความยาวของเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาลดลงโค้งการทดลองและโค้งแบบจำลองมีการซ้อนทับกันมากขึ้น

ผลของค่า d_D จากตารางทั้งสามก่อนหน้านี้นี้ได้จากการวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งระหว่างโค้งการทดลองและโค้งแบบจำลอง(วิธีวิเคราะห์เชิงถดถอย) สำหรับค่า d_D ในกรณีที่คำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์(วิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์) มีผลเป็นดังตารางต่อไปนี้

ตารางที่ 4 d_D ของอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อย ต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ต่างๆ ในปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีอัตราส่วนความยาวของโซนตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (l_2/L) เป็น 1/3, 1/10 และ 1/30 กรณีที่ใช้วิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์

r_D	d_D		
	$l_2/L=1/3$	$l_2/L=1/10$	$l_2/L=1/30$
0.333	0.4282	0.3568	0.3406
0.500	0.6000	0.5263	0.5085
0.667	0.7503	0.6900	0.6745
1.333	1.1998	1.2900	1.3184
1.500	1.2857	1.4286	1.4754
2.000	1.5000	1.8182	1.9355
3.000	1.8000	2.5000	2.8125

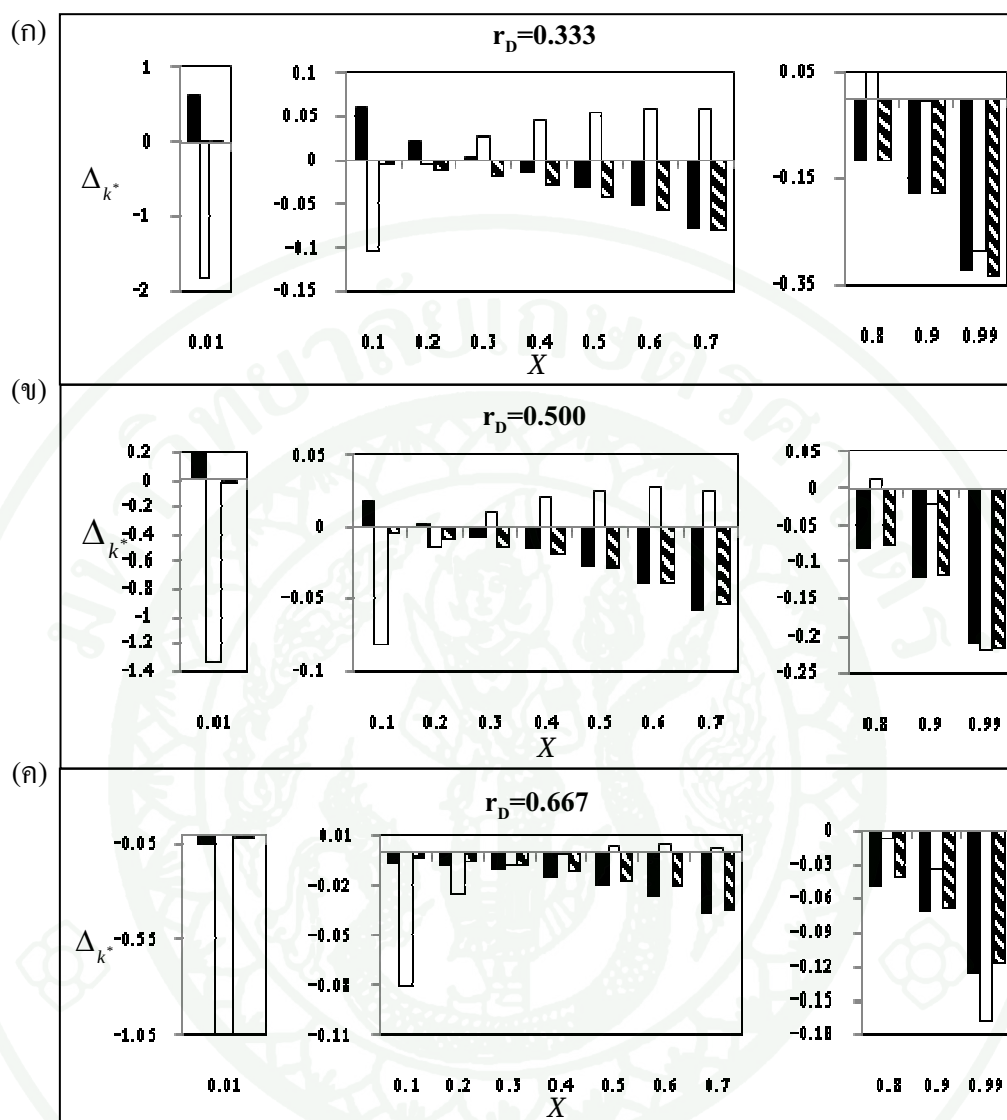
ตารางที่ 4 แสดงค่า d_D ของ r_D ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3, 1/10 และ 1/30 กรณีที่คำนวณจากนิพจน์ค่าเฉลี่ยไว้มิติที่ก๊าซอยู่ภายในปฏิกรณ์ ค่า d_D ที่วิเคราะห์จากวิธีนี้มีความคล้ายคลึงกับวิธีที่วิเคราะห์เชิงถดถอยคือที่ r_D น้อยกว่าหนึ่ง d_D ก็มีค่าน้อยกว่าหนึ่ง ส่วนที่ r_D มากกว่าหนึ่ง d_D ที่วิเคราะห์ได้ก็มีค่ามากกว่าหนึ่ง และสำหรับที่ r_D เดียวกันเมื่อความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาลดลง ค่า d_D มีค่าใกล้เคียง r_D มากขึ้น

หลังจากทราบค่า d_D ขึ้นตอนต่อไปเป็นขั้นตอนการวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยากรณีที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อย

การวิเคราะห์ความแม่นยำของการคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา

ความแม่นยำของการคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยากรณีที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนเฉลี่ยของก๊าซในทุกโซนภายในปฏิกรณ์แทปสามโซนแสดงในรูปของค่า Δ_k . Δ_k ขึ้นกับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนการแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (r_D) ,อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์ (l_2/L) และค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k^*) ในส่วนค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจะถูกนำเสนอในรูปของการแปลงผันของก๊าซ (X) เนื่องจากการแปลงผันของก๊าซเป็นข้อมูลปฐมภูมิ (Primary data) ผลการคำนวณค่า Δ_k ที่ X ระหว่าง 0.01-0.99 สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3, 1/10 และ 1/30 โดยมี r_D ต่างๆ ถูกแสดงดังต่อไปนี้

การเปรียบเทียบค่าความแตกต่างของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา; Δ_k ที่การแปลงผันของก๊าซ; X ระหว่าง 0.01-0.99 ในภาพที่ 9 เป็นกรณีที่ปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีอัตราส่วนความยาวเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์; l_2/L เท่ากับ 1/3 ที่มีอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟนุคเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคเฉื่อยต่ออนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา; r_D ที่น้อยกว่าหนึ่งจากการวิเคราะห์จาก 3 วิธีคือ การเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซ (■), การเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(■) การเสนอค่า Δ_k ในแต่ละ r_D จะแบ่งเป็นสามช่วงการแปลงผันของก๊าซ เนื่องจากการแปลงผันของก๊าซที่มีค่าต่ำมากและสูงมากๆ จะให้ผลของค่า Δ_k ที่สูงกว่าในช่วงการแปลงผันระหว่าง 0.10-0.70 มาก



ภาพที่ 9 การเปรียบเทียบค่า Δ_{k^*} ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/3$ เมื่อ r_D เท่ากับ 0.333 (ก), 0.500(ข)และ 0.667(ค) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(▨)

จากภาพค่า Δ_{k^*} ที่ X เท่ากับ 0.01 ที่วิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งมีค่าสูงมาก เนื่องจากค่าคงที่อัตราเร็วของ

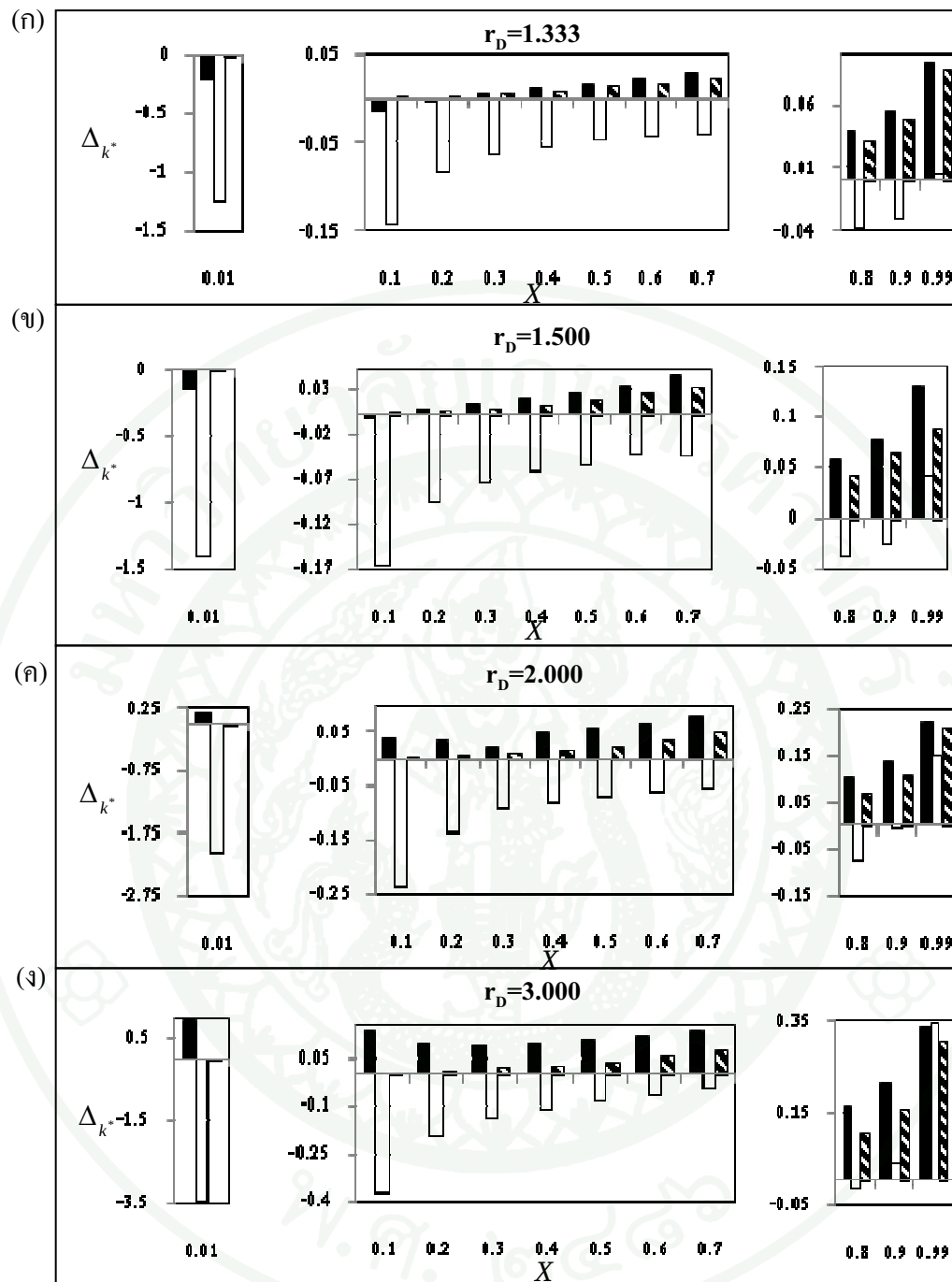
ปฏิกิริยาการเปลี่ยนแปลงผันของก๊าซต่างๆจะมีค่าต่ำมากเมื่อถูกนำมาใช้คำนวณหา Δ_k^* ในสมการที่ 49 จึงเป็นอีกหนึ่งสาเหตุที่ทำให้ $|\Delta_k^*|$ ที่คำนวณได้ในกรณีนี้มีค่าสูง

สำหรับค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์โดยวิธีเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ X เท่ากับ 0.01 มีค่า $|\Delta_k^*|$ สูงเช่นเดียวกับการวิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งในช่วงที่ X ระหว่าง 0.10-0.99 ค่า Δ_k^* ที่ได้รับการวิเคราะห์โดยวิธีนี้มีค่า $|\Delta_k^*|$ เพิ่มขึ้นตาม X ที่เพิ่มขึ้น

สำหรับกรณีที่วิเคราะห์โดยการคำนวณจากนิพจน์การเปลี่ยนแปลงผันของก๊าซ ค่า Δ_k^* ที่คำนวณได้มีค่าน้อยกว่าหนึ่งเสมอ $|\Delta_k^*|$ เพิ่มขึ้นตามค่า X ที่เพิ่มขึ้น

การเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ได้รับการวิเคราะห์วิธีเดียวกันพบว่าหากพิจารณาที่ X เดียวกันในช่วง 0.10-0.70 $|\Delta_k^*|$ สำหรับ r_D ที่มีค่าใกล้เคียงหนึ่งมากกว่าจะมีค่าน้อยกว่า X เท่ากับ 0.50 มีค่า $|\Delta_k^*|$ มีค่าคิดเป็นเปอร์เซ็นต์ไม่เกิน 2% สำหรับที่ r_D เท่ากับ 0.667 ส่วนที่ r_D เท่ากับ 0.500 และ 0.333 มีค่าไม่เกิน 3% และ 6% ตามลำดับ

สำหรับค่า Δ_k^* ที่ r_D มากกว่าหนึ่งในปฏิกิริยาแทปสามโซนที่มี I_2/L เท่ากับ 1/3 ถูกแสดงผลในภาพที่ 10



ภาพที่ 10 การเปรียบเทียบค่า Δ_{k^*} ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แท่งสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3 เมื่อ r_D 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอร์มัลไรซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(▨)

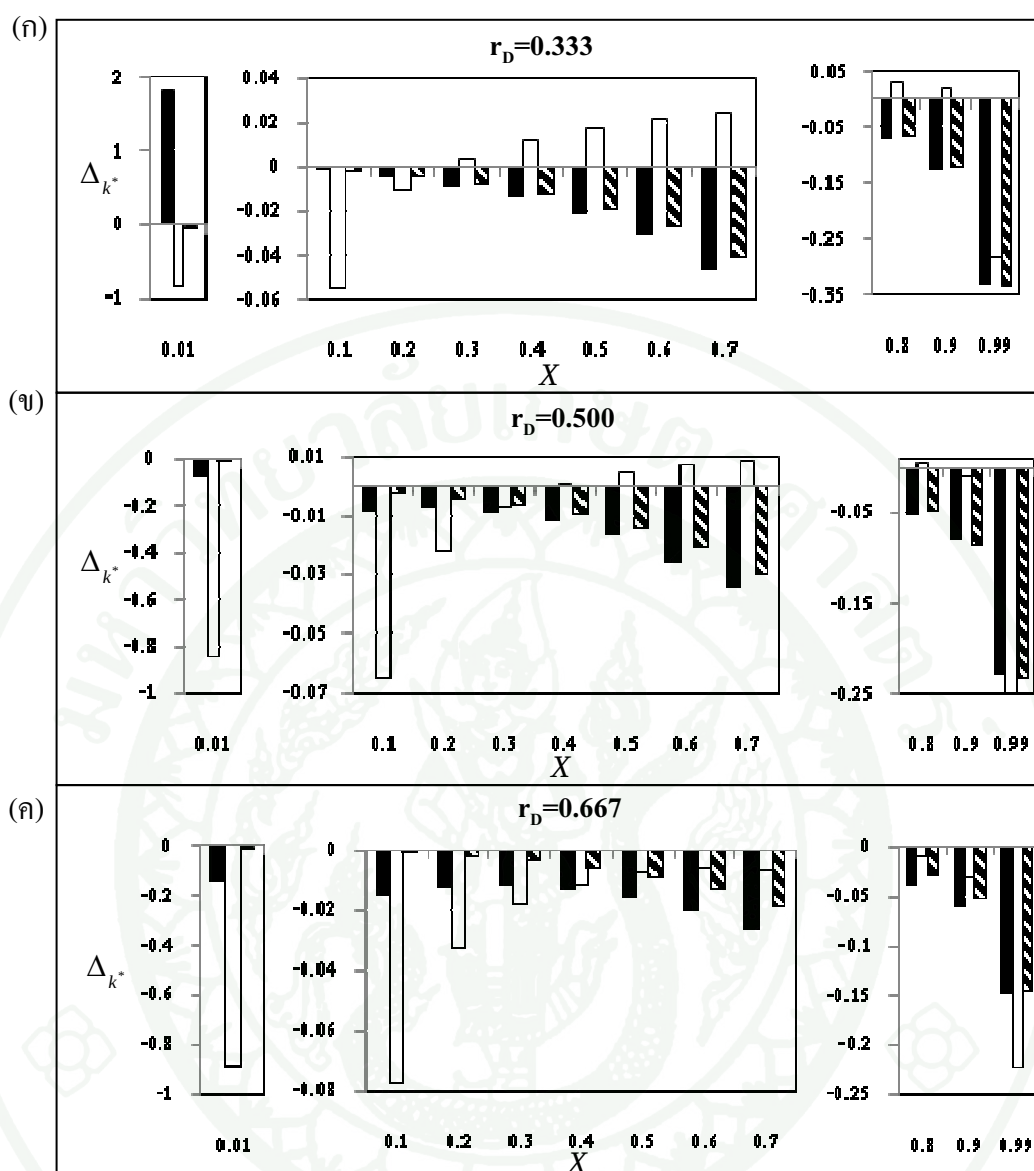
สำหรับกรณีที่ r_D มากกว่าหนึ่ง การเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แบบสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ $1/3$ เมื่อ r_D 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค) และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือ การเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซ (■) การเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่อุณหภูมิได้โคงให้เท่ากับหนึ่ง (□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(●) ถูกแสดงดังภาพที่ 10 ผลการคำนวณค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์จากการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่ X เท่ากับ 0.01 มีค่าสูงมาก หลังจากนั้นในช่วง X เท่ากับ 0.10-0.99 ค่า $|\Delta_k^*|$ มีค่าเพิ่มขึ้นเมื่อ X เพิ่มขึ้น และค่า Δ_k^* ที่คำนวณได้เป็นบวกเสมอ กรณีที่ r_D มากกว่าหนึ่งในช่วง X ระหว่าง 0.20-0.99 แสดงว่าค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณได้ (k_{est}^*) มากกว่าค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจริง (k_{real}^*)

จากวิธีวิเคราะห์โดยการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่อุณหภูมิได้โคงให้เท่ากับหนึ่งแสดงให้เห็นว่าค่า Δ_k^* ที่ X เท่ากับ 0.01 มีค่าสูงมากเช่นเดียวกับกรณีที่ r_D น้อยกว่าหนึ่ง และเมื่อพิจารณาในช่วง X ระหว่าง 0.10-0.70 พบว่าค่า Δ_k^* ที่ได้เป็นค่าติดลบในทุกค่า r_D และ $|\Delta_k^*|$ จะมีค่าลดลงเมื่อ X เพิ่มขึ้น

ผลการคำนวณค่า Δ_k^* ที่ X ต่างๆซึ่งวิเคราะห์โดยการคำนวณจากนิพจน์แปลงผันของก๊าซมีค่าเป็นบวกเสมอ ($k_{est}^* > k_{real}^*$) ค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์โดยวิธีนี้มีลักษณะเพิ่มขึ้นตามการแปลงผันของก๊าซที่เพิ่มขึ้นเหมือนกรณีที่ r_D น้อยกว่าหนึ่ง

ค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์จาก 3 วิธีในช่วง X ระหว่าง 0.010-0.70 มีค่า Δ_k^* คิดเป็นเปอร์เซ็นต์ไม่เกิน 8% สำหรับทุก r_D ที่มากกว่าหนึ่ง กรณีที่ r_D เท่ากับ 1.333 มีค่า Δ_k^* คิดเป็นเปอร์เซ็นต์ต่ำกว่า 2.5% ซึ่งน้อยกว่าที่ r_D เท่ากับ 1.500, 2.000 และ 3.000 ตามลำดับ ซึ่งผลของ $|\Delta_k^*|$ ในลักษณะนี้มีความสอดคล้องกับค่า d_D ที่คำนวณได้ในกรณีที่มิใช่เพียงการแพร่คือที่ r_D มีค่าเข้าใกล้หนึ่งมากขึ้นความแตกต่างระหว่างค่าที่คำนวณได้กับค่าจริงมีความใกล้เคียงกันมากขึ้น

ภาพที่ 9 และ 10 เป็นกรณีที่ปฏิกรณ์แบบสามโซนมีอัตราส่วนความยาวเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์เป็น $1/3$ ส่วนกรณีที่ความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาลดลงโดยที่ l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/30$ การเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ X ต่างๆ ถูกแสดงดังต่อไปนี้



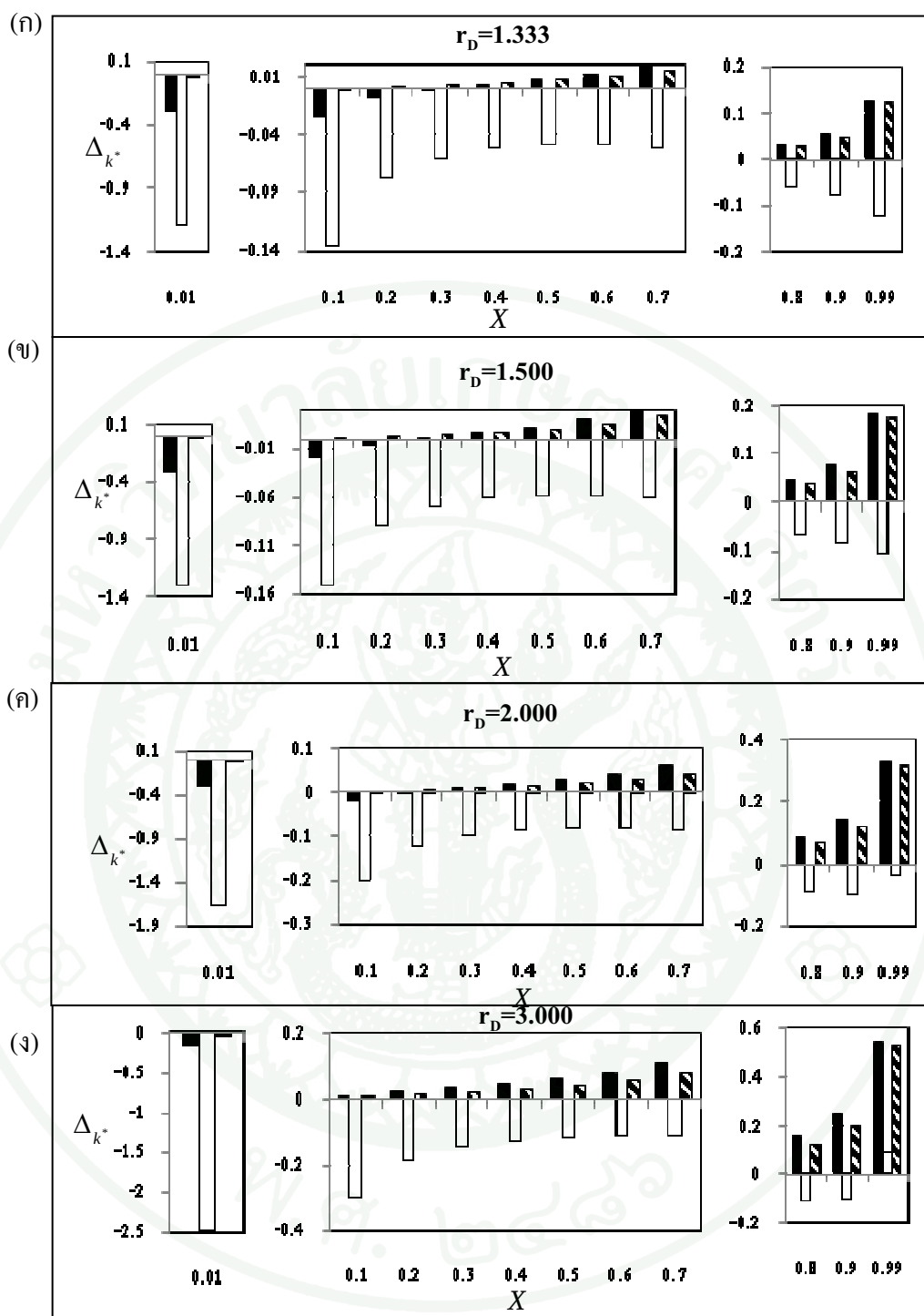
ภาพที่ 11 การเปรียบเทียบค่า Δ_{k^*} ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/10 เมื่อ r_D 0.333 (ก), 0.500(ข)และ0.667(ค) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้ง อัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของ ก๊าซที่ถูกนอร์มัลไรซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การ แปลงผันของก๊าซ(▨)

ปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มีความยาวของเบคอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (โซนที่ 2) ลดลงจากที่มี l_2/L เท่ากับ 1/3 เป็น l_2/L เท่ากับ 1/10 ถูกนำมาวิเคราะห์ความแม่นยำของการคำนวณค่าคงที่

อัตราเร็วของปฏิกิริยา ค่า Δ_k ที่วิเคราะห์ได้จากวิธีต่างๆ กรณีที่ r_D น้อยกว่าหนึ่งคือ r_D เท่ากับ 0.333 (ก), 0.500 (ข) และ 0.667 (ค) ที่ X ระหว่าง 0.01-0.99 ที่ได้จากวิธีวิเคราะห์การเทียบโค้ง อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ(■) การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูก นอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(●) ถูก แสดงในภาพที่ 11 ค่า Δ_k ที่ X เท่ากับ 0.01 สำหรับที่วิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งมีค่าติดลบสูงมากเช่นเดียวกับกรณีที่ I_2/L เท่ากับ $1/3$ ส่วนที่ X ระหว่าง 0.10-0.90 ค่า Δ_k ที่คำนวณได้มีทั้งค่าที่เป็นค่าบวกและค่าลบ โดย $|\Delta_k|$ ที่ X สูงกว่าจะมีค่าน้อยกว่าที่ X ต่ำกว่า แต่ที่ X เท่า 0.99 ค่า $|\Delta_k|$ จะมีค่าสูงขึ้นมากอีกครั้ง

ผลจากการวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติแสดงให้เห็นว่าที่ Δ_k ในช่วง X ระหว่าง 0.10-0.99 มีค่าติดลบโดยค่า $|\Delta_k|$ ที่ X สูงกว่าจะมีค่ามากกว่า การติดลบของ Δ_k ที่คำนวณได้เป็นผลมาจากสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดเซนเฉลี่ยของก๊าซทำปฏิกิริยา (D_{avg}^{rg}) ที่ถูกนำมาใช้แทนค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟที่ฟลูเดเซนของก๊าซทำปฏิกิริยาในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (D_2^{rg}) กรณีที่ r_D น้อยกว่าหนึ่งหากเปรียบเทียบ D_{avg}^{rg} กับ D_2^{rg} พบว่า D_{avg}^{rg} มีค่าน้อยกว่า

หากพิจารณากรณีการวิเคราะห์โดยคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซให้ค่า Δ_k ที่ติดลบในทุก X สาเหตุที่ทำให้ Δ_k ติดลบคือ D_{avg}^{rg} ที่คำนวณได้มีค่าน้อยกว่า D_2^{rg} เมื่อนำ D_{avg}^{rg} มาใช้คำนวณแทน D_2^{rg} ค่า k_{est}^* ที่ได้จึงมีค่าน้อยลงจากค่าจริง



ภาพที่ 12 การเปรียบเทียบค่า Δ_{k^*} ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/10 เมื่อ r_D 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไรซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(▨)

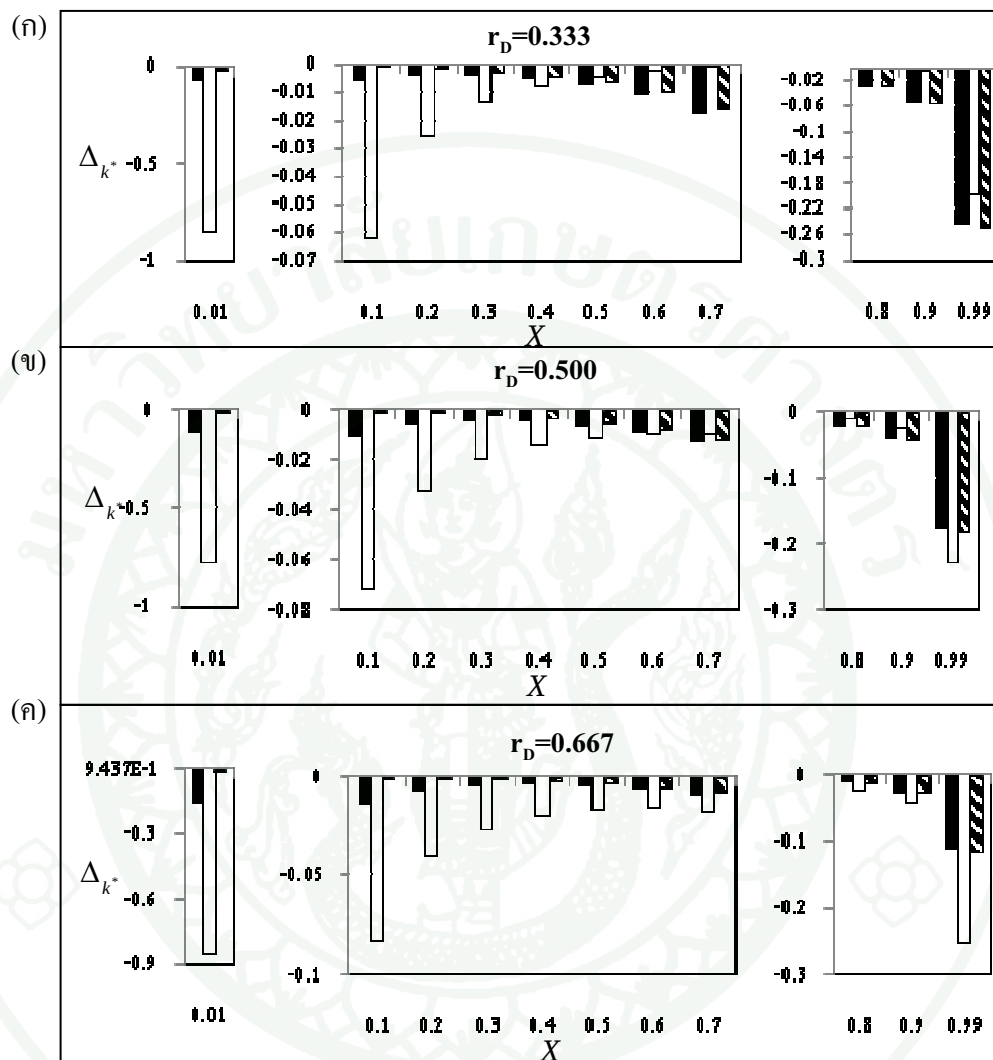
กรณีที่ r_D มากกว่าหนึ่งการเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ X ระหว่าง 0.01-0.99 สำหรับปฏิกิริยาแทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/10 เมื่อ r_D เท่ากับ 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่อุณหภูมิไอซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(●) ถูกแสดงในภาพที่ 12 ผลการวิเคราะห์หาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาโดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติมีค่า Δ_k^* ที่คำนวณได้มีทั้งค่าที่เป็นบวกและลบ โดยที่ X เท่ากับ 0.01 พบว่า Δ_k^* ที่คำนวณได้มีค่าติดลบที่สูง โดยที่ r_D ที่มากขึ้น (มากกว่าหนึ่งมากขึ้น) จะมี $|\Delta_k^*|$ ที่สูงขึ้น ส่วนในช่วง X ระหว่าง 0.10-0.99 ค่า Δ_k^* มีค่าค่อยๆ เพิ่มขึ้นตาม X ที่เพิ่มขึ้นในทิศทางด้านบวก

การใช้ค่า d_D ที่คำนวณได้จากกรณีที่มิใช่เพียงการแพร่เพียงอย่างเดียวมาคำนวณเพื่อหาค่า k_{est}^* โดยการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซกรณีที่เกิดปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง สำหรับกรณีที่ l_2/L เท่ากับ 1/10 โดยมีค่า r_D มากกว่าหนึ่งพบว่าค่า Δ_k^* ที่คำนวณได้มีค่าเป็นบวกเสมอโดยจะมีค่าเพิ่มขึ้นตาม X ที่เพิ่มขึ้น ซึ่งมีรูปแบบเดียวกันกับที่ l_2/L เท่ากับ 1/3 การเปรียบเทียบ Δ_k^* ที่คำนวณได้ระหว่างที่ l_2/L เท่ากับ 1/10 และ 1/3 กรณีที่ r_D มากกว่าหนึ่ง (สามารถพิจารณาค่าเชิงตัวเลขอย่างละเอียดได้ที่ตารางผนวกที่ ค.) พบว่าในช่วงการแปลงผันของก๊าซที่ไม่สูงมากคือระหว่าง 0.01-0.70 ค่า Δ_k^* ที่ได้จาก l_2/L เท่ากับ 1/10 จะน้อยกว่าที่ l_2/L เท่ากับ 1/3 เสมอ ส่วนที่ X ตั้งแต่ 0.80-0.99 เป็นช่วงที่ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยามีค่าสูงขึ้นมาก ค่า k_{est}^* ที่ประมาณได้จึงมีค่าที่สูงมากเช่นกัน

การวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติของก๊าซที่อุณหภูมิไอซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งจะให้ค่า Δ_k^* ติดลบสำหรับทุก X $|\Delta_k^*|$ ที่ X เท่ากับ 0.01 สูงมาก และจะลดลงเมื่อ X เพิ่มขึ้น

ค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์จากทั้งสามวิธีที่แสดงในภาพที่ 12 แสดงให้เห็นว่า Δ_k^* ที่คำนวณได้จากที่ l_2/L เท่ากับ 1/10 มีค่าน้อยกว่ากรณีที่ l_2/L เท่ากับ 1/3 กรณีที่ r_D เดียวกันและ X ที่เท่ากัน ผลลัพธ์เช่นนี้แสดงให้เห็นว่าความยาวของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยาที่สั้นกว่าส่งผลต่อความแม่นยำของการคำนวณหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา (k_{est}^*) มากขึ้นสำหรับที่ X ระหว่าง 0.10-0.70

หากความยาวของเบตตัวเร่งปฏิกิริยาถูกลดขนาดลงให้มีความบางมากเมื่อเทียบกับความยาวทั้งปฏิกิริยาผลของความแม่นยำในการคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาเป็นดังนี้



ภาพที่ 13 การเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกิริยาแทปสามโซนที่ l_2/L เท่ากับ 1/30 เมื่อ r_D 0.333 (ก), 0.500(ข)และ0.667(ค) จากการวิเคราะห์ 3 วิธีคือการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกลดอัตราเร็วพื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(▨)

ภาพที่ 13 แสดงการเปรียบเทียบค่า Δ_k ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกิริยาแทปสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/30 กรณีที่ r_D ต่างๆที่น้อยกว่าหนึ่งคือเท่ากับ 0.333 (ก), 0.500(ข) และ 0.667(ค) จากการวิเคราะห์ทั้ง 3 วิธี คือ การเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซ (■) การเทียบโค้ง

อัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(๙) ผลการคำนวณจากวิธีวิเคราะห์ทั้งสามในทุกค่า r_D ให้ผลที่มีรูปแบบเช่นเดียวกันกับที่ l_2/L เท่ากับ $.1/10$ และ $1/3$ คือที่ X เท่ากับ 0.01 ค่า $|\Delta_k^*|$ จะมีค่าสูงสำหรับกรณีที่ได้จากวิธีเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซและการการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง ส่วนการวิเคราะห์โดยอาศัยการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซจะให้ค่า Δ_k^* ติดลบในทุก X และมี $|\Delta_k^*|$ สูงขึ้นตาม X ที่เพิ่มขึ้น

ความแม่นยำของการคำนวณหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาเมื่อความยาวของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยาลดลงสำหรับกรณีที่วิเคราะห์โดยการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซเมื่อเปรียบเทียบระหว่างกรณีที่ l_2/L เท่ากับ $1/3$, $1/10$ และ $1/30$ ในทุกค่า r_D สำหรับ X ที่เท่ากับ l_2/L ที่น้อยกว่าจะมีค่า Δ_k^* น้อยกว่า กรณีที่ l_2/L เท่ากับ $1/30$ เป็นกรณีที่เบ็ดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาสั้นมากเมื่อเทียบกับความยาวของปฏิกรณ์ พิจารณานิพจน์การแปลงผันของก๊าซสำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนซึ่งแสดงในสมการที่ (50) หากเบ็ดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาสั้นมากจนกระทั่งเกือบเท่ากับศูนย์ ($l_2 \rightarrow 0$) (Gleaves *et al*, 2001) นิพจน์เชิงโมเมนต์อันดับศูนย์สำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซนสามารถเขียนได้ดังนี้

$$X = 1 - \frac{1}{1 + \frac{k_{real}^* l_2 l_3}{r_D L^2}} \quad (52)$$

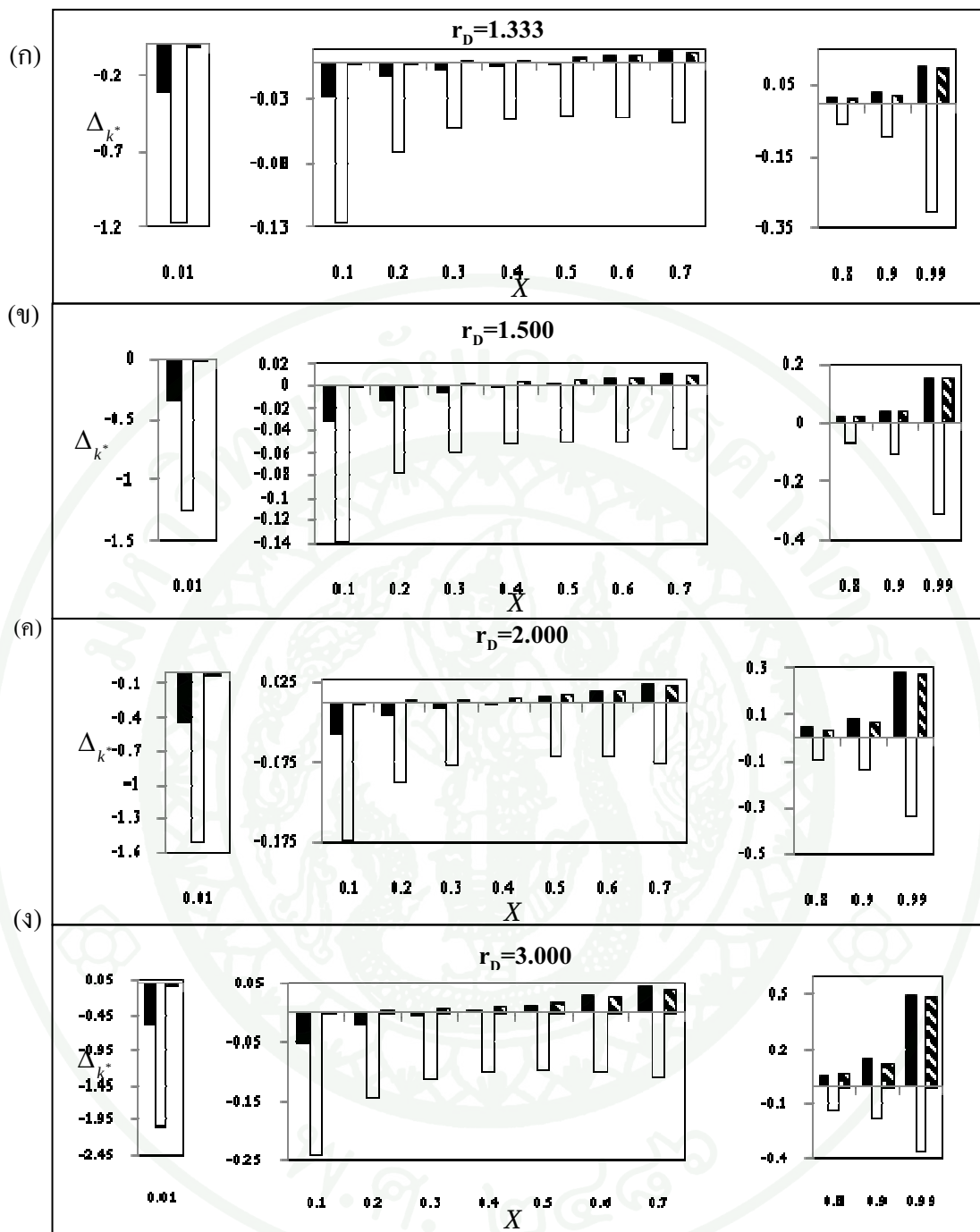
สำหรับกรณีเดียวกันคือเมื่อ ($l_2 \rightarrow 0$) นิพจน์เชิงการแปลงผันของก๊าซในสมการที่ (51) เป็นดังต่อไปนี้

$$X = 1 - \frac{1}{1 + \frac{k_{est}^* l_2 l_3}{d_D L^2}} \quad (53)$$

จากสมการที่ (52) และ สมการที่ (53) จะเห็นได้ว่ากรณีที่ความยาวของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยาที่สั้นมากคือ $l_2 \rightarrow 0$ การคำนวณหาค่า k_{est}^* หากใช้ d_D ที่มีค่าใกล้เคียง r_D จะให้ค่า k_{est}^* มีค่าใกล้เคียงกับ k_{real}^* ซึ่งค่า d_D ในกรณีที่ l_2/L เท่ากับ $1/30$ ที่แสดงในตารางที่ 2 ก็มีค่าใกล้เคียงค่า r_D มากกว่าในกรณีที่ l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/3$

ผลของการเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ได้รับการวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งทั้งสองวิธีให้ผลเช่นเดียวกันกับที่วิเคราะห์โดยใช้การแปลงผันของก๊าซที่เท่ากันคือค่า $|\Delta_k^*|$ ที่ l_2/L เท่ากับ $1/30$ มีค่าน้อยกว่าที่ l_2/L เท่ากับ $1/10$ และ $1/3$ ตามลำดับ สำหรับที่ r_D เท่ากันและ X เดียวกัน (ผลลัพธ์เชิงตัวเลขของค่าความแตกต่างแสดงในตารางผนวกที่ ค)

ความแม่นยำของการคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาเมื่อ l_2/L เท่ากับ $1/30$ กรณีที่ r_D มากกว่าหนึ่งแสดงในภาพที่ 14 การเปรียบเทียบค่า Δ_k^* ที่ X ต่างๆ กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีเทียบโค้งทั้งสองวิธีมีค่า $|\Delta_k^*|$ ทางด้านติดลบสูงที่ X เท่ากับ 0.01 ค่า $|\Delta_k^*|$ จะมีค่าค่อยๆ ลดลงแล้วเพิ่มขึ้นอีกครั้งและจะมีค่า $|\Delta_k^*|$ สูงมากที่ X เท่ากับ 0.99 ค่า Δ_k^* ที่วิเคราะห์จากวิธีเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซมีค่าทั้งบวกและลบแต่สำหรับการวิเคราะห์โดยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซที่ถูกนอมัลไลซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งค่า Δ_k^* ที่คำนวณได้มีค่าเป็นลบเสมอทุก X ในทุกค่า r_D ส่วนการวิเคราะห์โดยการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซจะให้ค่า Δ_k^* เป็นบวกเสมอและมีค่า Δ_k^* เพิ่มขึ้นตาม X ที่เพิ่มขึ้น



ภาพที่ 14 การเปรียบเทียบค่า Δ_{k^*} ที่ X ต่างๆ สำหรับปฏิกรณ์แท่งสามโซนที่มี l_2/L เท่ากับ 1/30 เมื่อ r_D เท่ากับ 1.333(ก), 1.500(ข), 2.000 (ค)และ 3.000 (ง) จากการวิเคราะห์ 3 วิธี คือการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซ(■), การเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ของก๊าซที่อุณหภูมิไรซ์พื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่ง(□) และ การคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ(▨)

ผลการวิเคราะห์ความแม่นยำของการคำนวณหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจากวิธีวิเคราะห์ทั้งสามพบว่าค่าของ $|\Delta_k|$ ที่ได้จากการวิเคราะห์โดยการเทียบโคงอัตราการไหลขาออก ไร้มติของก๊าซที่อุณหภูมิไอซ์พื้นที่ได้โคงให้เท่ากับหนึ่งส่วนใหญ่มีค่าสูงกว่าการวิเคราะห์โดยการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มติของก๊าซและการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ เนื่องจากก่อนโคงอัตราการไหลขาออกไร้มติของก๊าซที่อุณหภูมิไอซ์พื้นที่ได้โคงให้เท่ากับหนึ่ง ต้องนำโคงอัตราการไหลขาออกไร้มติของก๊าซที่จะนำมาเทียบกันทำให้มีพื้นที่ได้โคงเท่ากันก่อน คือเท่ากับหนึ่ง ดังนั้นการเทียบโคงในลักษณะนี้เป็นการพิจารณาในส่วนของรูปร่างของโคง ส่วนการเทียบโคงอัตราการไหลขาออกไร้มติของก๊าซเป็นการเทียบทั้งด้านขนาดและรูปร่างของโคงทั้งสองที่นำมาเทียบกันจึงให้ค่าที่ละเอียดกว่า สำหรับการวิเคราะห์ที่อาศัยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซในการคำนวณเป็นวิธีที่มีความคลาดเคลื่อนต่ำเนื่องจากการใช้ผลเฉลยเชิงวิเคราะห์ (Analytical solution) ในการคำนวณ

สรุปและข้อเสนอแนะ

สรุป

งานวิจัยนี้เป็นการวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่คำนวณภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สเท่ากันทุกโซน การวิเคราะห์เริ่มจากการวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สภายใต้ข้อสมมติฐานที่กำหนดให้ทุกโซนในปฏิกรณ์แบบสามโซนมีสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สเท่ากันกรณีที่มีเพียงการแพร่ วิธีที่ใช้สำหรับวิเคราะห์แบ่งเป็นวิธีวิเคราะห์เชิงถดถอยที่ใช้กำลังสองน้อยที่สุดเป็นเกณฑ์ และวิธีวิเคราะห์เชิงโมเมนต์ที่อาศัยวิธีคำนวณจากนิพจน์เวลาเฉลี่ยที่แก๊สอยู่ภายในปฏิกรณ์ ผลการวิเคราะห์จากทั้งสองวิธีแสดงว่าเมื่อความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาสั้น อัตราส่วนระหว่างสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (r_D) เข้าใกล้หนึ่ง ค่าอัตราส่วนระหว่างสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สเฉื่อยของแก๊สต่อสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สในโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาหรือค่าแฟกเตอร์ความเบี่ยงเบน (d_D) ที่คำนวณได้มีค่าใกล้เคียงค่ากับค่า r_D มากขึ้น

หลังจากทราบค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊ส ขั้นตอนต่อมาเป็นการหาค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาเมื่อใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สในทุกโซนภายในปฏิกรณ์แบบสามโซน โดยวิธีวิเคราะห์ทั้งสามวิธีคือการเทียบโค้งอัตราการผลิตออกไรมิต การไหลขาออกไรมิตที่ถูกลดมลพิษพื้นที่ได้โค้งให้เท่ากับหนึ่งและการคำนวณจากนิพจน์การแปลงผัน ผลการคำนวณแสดงให้เห็นว่า การแปลงผันของแก๊สที่ต่ำ ความยาวของเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่สั้น และค่าอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใกล้เคียงหนึ่งให้ผลความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาสูง สำหรับการแปลงผันของแก๊สที่ไม่เกิน 0.5 และ I_2/L เท่ากับ 1/30 ความคลาดเคลื่อนของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่วิเคราะห์จากวิธีทั้งสามเมื่ออัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ระหว่าง 0.667-1.333 มีค่าไม่เกิน 2%

ข้อเสนอแนะ

การวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยากรณีที่ใช้สัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สเท่ากันทุกโซนทำให้ทราบถึงปัจจัยที่ส่งผลต่อค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา เช่น ความยาวของเบ็ดตัวเร่งปฏิกิริยา, ช่วงการแปลงผันของแก๊ส และสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สเป็นต้น อย่างไรก็ตามการวิเคราะห์ในงานวิจัยนี้ได้อธิบายอัตราการไหลเข้าปฏิกิริยาของแก๊สโดยใช้เดลต้าฟังก์ชัน (Delta function) แต่ขณะวิจัยหลายครั้งไม่เชื่อว่าช่วงเวลาทีวาล์วพัลส์เปิด-ปิดสั้นพอ การวิเคราะห์ความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาภายใต้ข้อสมมติฐานที่ให้สัมประสิทธิ์การแพร่ของแก๊สเท่ากันทุกโซนในปฏิกิริยาแบบสามโซนโดยที่อัตราการไหลเข้าปฏิกิริยาของแก๊สไม่ได้ใช้ฟังก์ชันเดลต้าจะทำให้สามารถเห็นความแม่นยำของค่าคงที่อัตราเร็วได้ชัดเจนและกว้างขวางขึ้น

นอกจากนี้วิธีการที่ใช้สำหรับวิเคราะห์หาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สและค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาในงานวิจัยนี้ทำโดยการหาสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สจากกรณีที่เกิดการแพร่เพียงอย่างเดียวก่อน ส่วนค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาจะถูกวิเคราะห์หาเมื่อทราบค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เอฟเฟกทีฟของแก๊สแล้ว หากทำการวิเคราะห์หาพารามิเตอร์ทั้งสองพร้อมกัน ความแม่นยำของพารามิเตอร์ทั้งสองมีค่าสูงจะทำให้การทดลองมีความสะดวกขึ้น

เอกสารและสิ่งอ้างอิง

- Cunningham, R.E. and R.J.J. Williams. 1980. **Diffusion in gas and porous media..** Plenum Press, New York.. *Cited by* Phanawadee, P. 1997. **Theory and methodology of TAP Knudsen pulse experiments. Ph.D. thesis., Washington Univ., Saint Louis, Missouri.**
- Huizenga, D.G. and D.M. Smith. 1986. Knudsen diffusion in random assemblages of uniform sphere. **AIChE Journal** 32: 1-6.
- Kreyszig, E. 1993. **Advanced Engineering Mathematics.** 7th ed., John Wiley and Sons, Inc., Singapore.
- Gleaves, J.T., G.S. Yablonskii, P. Phanawadee and Y. Schuurman. 1997. TAP-2: An interrogative kinetic approach. **App.Catal. A: General** 160: 55-88.
- _____, J.R. Ebner and T.C. Kuechler. 1988. Temporal Analysis of Products (TAP)- A unique catalyst evaluation system with submillisecond time resolution. **Catal. Rev. Sci. Eng.** 30 (1): 49-116.
- Petzold, L.R. 1983. Automatic selection of methods for solving stiff and nonstiff systems of ordinary differential equations. **Siam J. Sci. Stat. Comput.** 4 (1): 136-148.
- Phanawadee, P. 1997. **Theory and methodology of TAP Knudsen pulse response experiments.** Ph.D thesis, Washington Univ., Saint Louis, Missouri..
- _____, G.S. Yablonsky, P. Preechasanongkit and K. Somapa. 1999. A new correlation for determination of the effective Knudsen diffusivity of a gas in a TAP reactor. **Ind. Eng. Chem. Res.** 38: 2877-2878.

Shekhtman, S.O., Yablonsky, S. Chen and J.T. Gleaves. 1999. Thin-zone TAP reactor-Theory and application. **Chem. Eng. Sci.** 54: 4371-4378.

Tantake, P., P.Phanawadee, Y. Boonnumpha and J. Limtrakul. 2007. Comparison between regression analysis and moment analysis for transport and kinetic parameter estimation in TAP experiments under a non-ideal inlet condition. **Catal. Today** 121: 261-268.

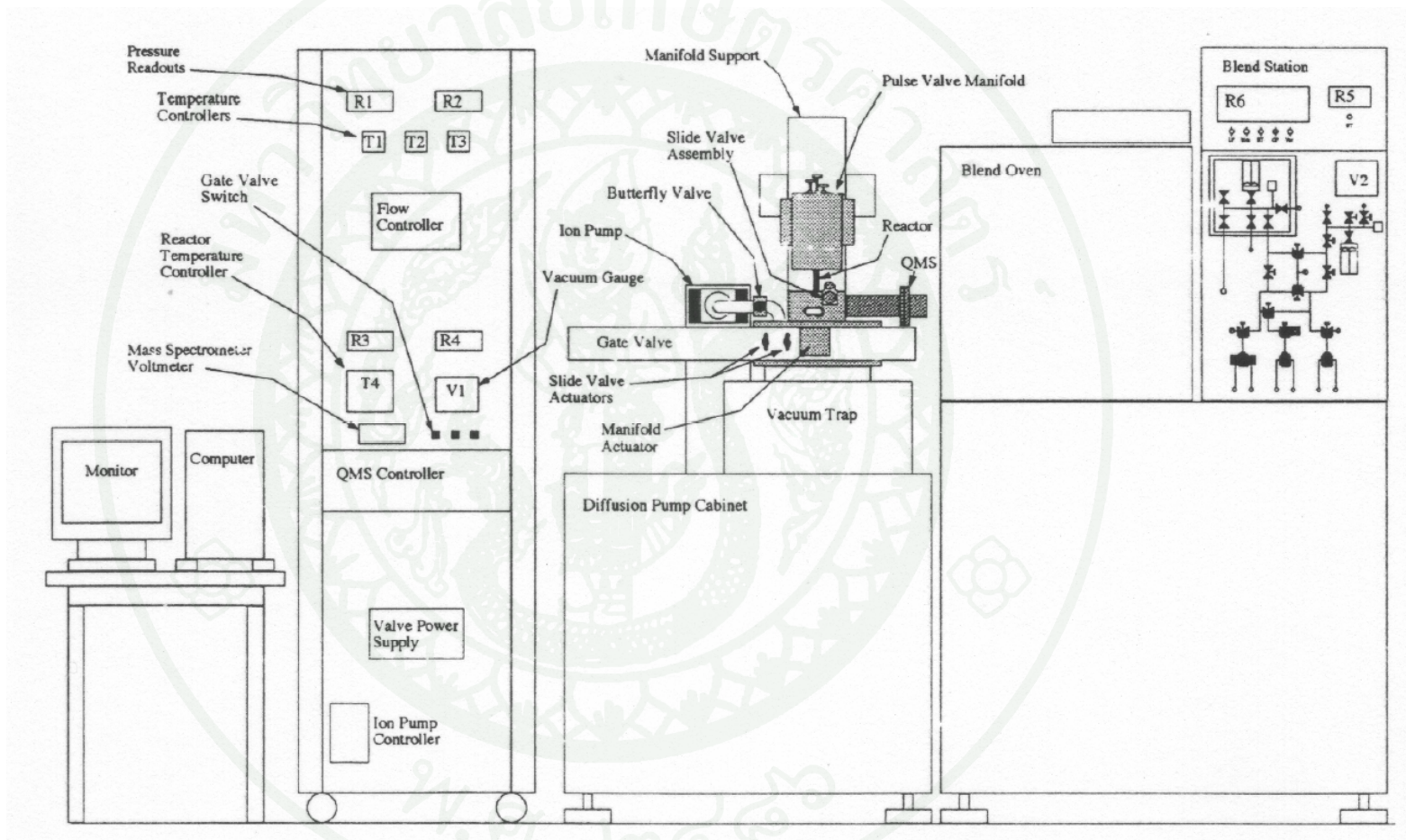
Yablonsky, G.S., S.O. Shekhtman, P. Phanawadee and J.T. Gleaves. 2001. General expression for primary characterization of catalyst activity using TAP pulse response experiment. **Catal. Today** 64: 227-231.





ภาคผนวก ก

ลักษณะและการทำงานของระบบปฏิกรณ์ TAP-2



ภาพผนวกที่ ก1 ระบบปฏิกรณ์ TAP-2

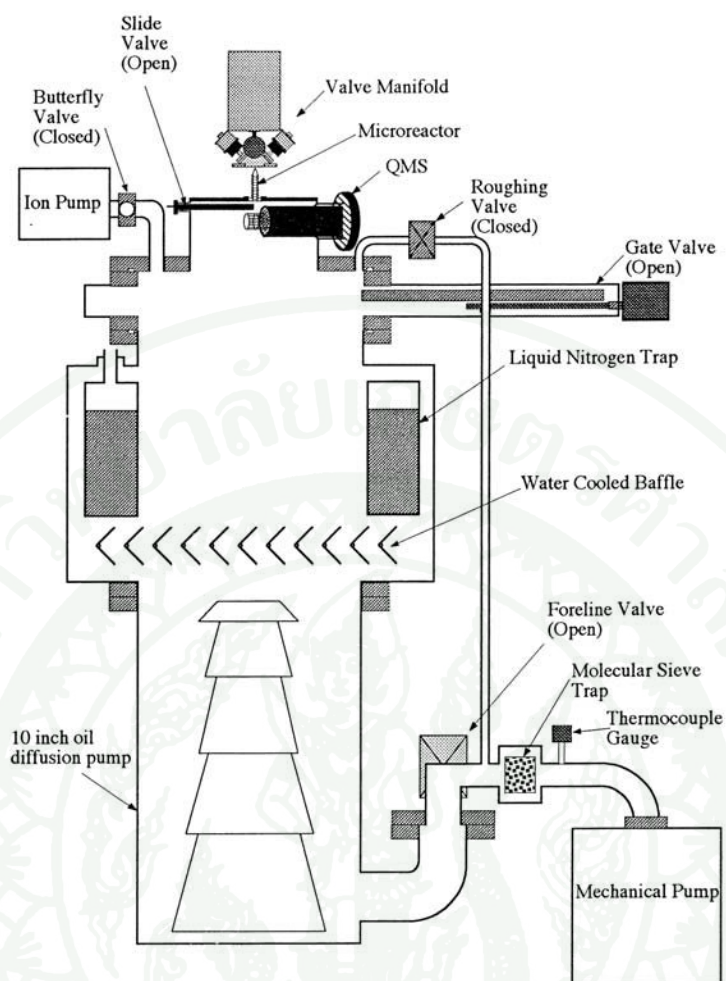
ที่มา: *Gleaves et al., 1997*

ลักษณะและการทำงานของระบบปฏิบัติการ TAP-2

ระบบปฏิบัติการ TAP-2 ตามที่แสดงในภาพผนวกที่ ก 1 ประกอบด้วยอุปกรณ์พื้นฐานต่อไปนี้ (1) ระบบสุญญากาศ (2) ระบบวาล์ว (ท่อนำก๊าซ) (3) ปฏิกรณ์ขนาดจิ๋วและชุดควบคุมอุณหภูมิ (4) แมสสเปกโตรมิเตอร์แบบควอดรูโพล (Quadrupole mass spectrometer, QMS) (5) ระบบคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการควบคุมติดตามและบันทึกข้อมูลจากระบบ

1. ระบบสุญญากาศ

โครงสร้างอย่างง่ายของระบบสุญญากาศ TAP-2 ดังแสดงในภาพผนวกที่ ก2 ประกอบด้วยห้องสองห้องที่แยกจากกันด้วยเกตวาล์ว (Gate valve) ห้องแรกที่อยู่ด้านบนมีการติดตั้งแมสสเปกโตรมิเตอร์และวาล์วแบบแผ่นเลื่อน (Slide-valve) ที่มีหน้าที่แยกห้องสุญญากาศ (Vacuum chamber) ออกจากปฏิกรณ์ขนาดจิ๋วและปรับให้ปฏิกรณ์ทำงานได้ทั้งในสถานะสุญญากาศและที่ความดันบรรยากาศปกติ สำหรับห้องด้านล่าง (Lower chamber) ประกอบด้วยส่วนกักเก็บไนโตรเจนเหลว (Liquid nitrogen trap) เพื่อเพิ่มการกั้นตัวของไอ ส่วนชุดแผ่นกั้นที่เลี้ยงด้วยน้ำหล่อเย็นทำหน้าที่ป้องกันการไหลของน้ำมันของปั๊มการแพร่ (Diffusion pump) เข้าไปในห้องสุญญากาศ ห้องสุญญากาศดังกล่าวเชื่อมต่ออยู่กับปั๊มเชิงกลโดยมีอัตราการปั๊ม 35 ลูกบาศก์เมตรต่อชั่วโมงและมีตัวกรองโมเลกุล (Molecular sieve) เพื่อป้องกันการแพร่ของน้ำมันเข้าสู่ระบบสุญญากาศ การติดตามการเปลี่ยนแปลงความดันทำได้โดยการติดตั้งเกจแบบเทอร์โมคัปเปิล (thermocouple, TC) ระหว่างปั๊มการแพร่และปั๊มเชิงกล

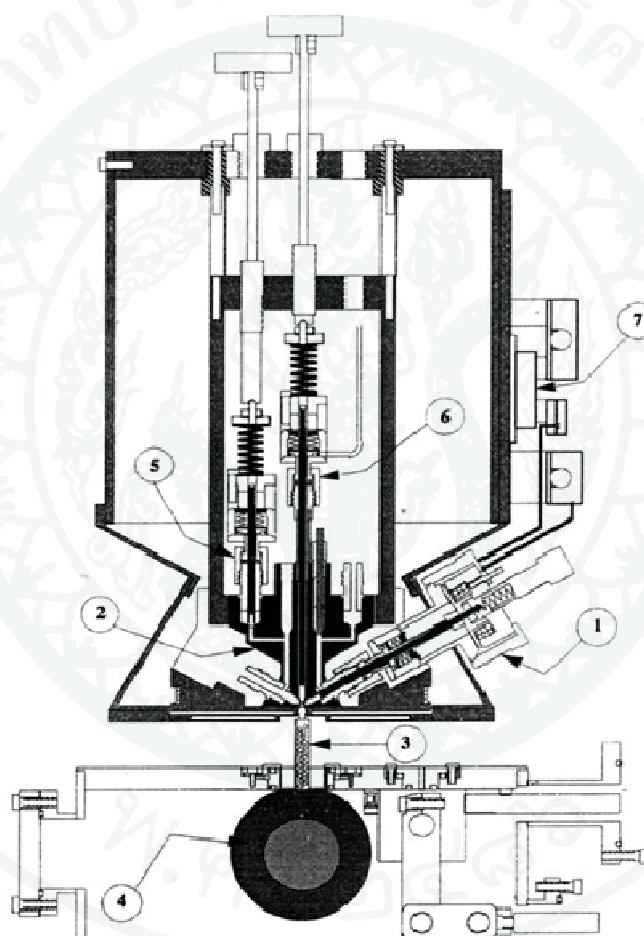


ภาพผนวกที่ ก2 ระบบสุญญากาศในระบบปฏิบัติการ TAP-2

ที่มา: Gleaves *et al.*, (1997)

2. ระบบวาล์ว (ท่อนำก๊าซ)

ภาพผนวกที่ ก3 แสดงระบบวาล์ว (ท่อนำก๊าซ) ประกอบด้วยมณีโพลด์ (Manifold) สเตนเลส พัลส์วาล์วความเร็วสูง (High speed pulse-valve) วาล์วสุญญากาศ (Vacuum-valve) จำนวน 4 ตัว ปกคลุมความร้อน (Heat shroud) ที่เป็นอะลูมิเนียม เครื่องให้ความร้อนชนิดอะลูมิเนียมและสวิตช์ไฟฟ้า (Mosfet switching circuit) ท่อและวาล์วในส่วนที่เปียกจะทำด้วยโลหะสเตนเลส ยกเว้น ก้านวาล์วซึ่งทำด้วย Vespel



ภาพผนวกที่ ก3 ระบบปฏิกรณ์ TAP-2: (1) พัลส์วาล์วความเร็วสูง (2) มณีโพลด์ (3) ปฏิกิริยา (4) แมสสเปกโตรมิเตอร์ (5) วาล์วสุญญากาศ (6) วาล์วควบคุมการไหลโดยมือ (7) สวิตช์ไฟฟ้า

ที่มา: Gleaves *et al.*, (1997)

หลักการทำงาน

การทำงานของระบบพัลส์วาล์วถูกควบคุมด้วยระบบแม่เหล็กไฟฟ้า ที่เกิดจากการให้กระแสไฟฟ้าผ่านขดลวดในช่วงเวลาสั้นๆ ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงความเข้มของสนามแม่เหล็กในการเหนี่ยวนำ จานแม่เหล็ก (Magnetic disc) ซึ่งติดกับก้านวาล์วเมื่อมีการฉีดก๊าซเข้าสู่ระบบก้านวาล์วจะถูกยกขึ้นเพื่อให้ก๊าซปริมาณเล็กน้อยไหลออกจากวาล์วและเมื่อไม่มีสนามแม่เหล็ก ก้านวาล์วจะถูกดึงกลับมาสู่ตำแหน่งเดิมด้วยแรงของสปริงที่ติดตั้งอยู่ด้านหลังของจานแม่เหล็ก โดยทั่วไปการฉีดก๊าซเข้าสู่ปฏิกรณ์ในแต่ละครั้งจะใช้เวลา (FWHM) ประมาณ 250-500 ไมโครวินาทีและมีปริมาณความเข้มของพัลส์แปรเปลี่ยนไม่เกิน 5 เปอร์เซ็นต์

3. ปฏิกรณ์ขนาดจิ๋วและชุดควบคุมอุณหภูมิ

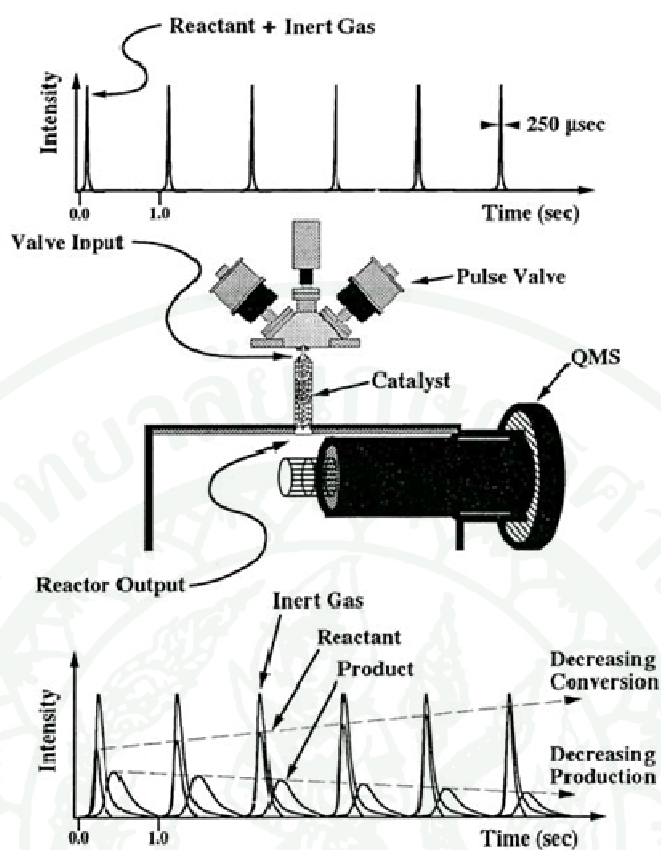
ปฏิกรณ์จิ๋วที่เป็นไปตามมาตรฐานของระบบ TAP-2 เป็นปฏิกรณ์แบบท่อ (Tubular reactor) ทำด้วยโลหะสแตนเลสขนาดความยาว 2.54 เซนติเมตร เส้นผ่านศูนย์กลาง 0.38 เซนติเมตร และประกอบด้วยเทอร์โมคัปเปิลขนาด 0.05 เซนติเมตร เทอร์โมคัปเปิลถูกสอดผ่านผนังของปฏิกรณ์เข้าไปในชั้นของตัวเร่งปฏิกิริยาและสามารถเปลี่ยนได้หากเกิดชำรุด นอกจากนั้นที่ผนังของปฏิกรณ์มีขดลวดไฟฟ้าสำหรับให้ความร้อนติดตั้งอยู่ปฏิกรณ์ขนาดจิ๋วตามมาตรฐานถูกออกแบบให้ทำงานที่อุณหภูมิ 700 องศาเซลเซียสและสามารถควบคุมอุณหภูมิให้แตกต่างกันได้ไม่เกิน 1 องศาเซลเซียสเมื่อทำงานแบบโปรแกรมอุณหภูมิ อุณหภูมิของปฏิกรณ์สามารถเพิ่มขึ้นตามเวลาในอัตราที่มากกว่า 20 องศาเซลเซียสต่อนาที ปริมาณตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้โดยปกติประมาณ 100-300 มิลลิกรัม

4. แมสสเปกโตรมิเตอร์

ระบบปฏิกรณ์ TAP-2 ใช้แมสสเปกโตรมิเตอร์แบบควอดรูโพลซึ่งมีช่วงความสามารถในการวัดมวลระหว่าง 0-300 amu พารามิเตอร์ควบคุมสำคัญคือความไว (Sensitivity) ความกว้างของการสแกน (scan width) และศูนย์กลางการสแกน (Scan center) ทั้งหมดสามารถปรับตั้งได้โดยมือหรือควบคุมโดยคอมพิวเตอร์

5. ระบบคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการควบคุม

ระบบปฏิกรณ์ TAP-2 ประกอบด้วยคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการควบคุมและเก็บข้อมูล โดยพารา มิเตอร์ที่ใช้การทดลอง เช่น ลำดับการทำงานของพัลส์วาล์ว ความถี่ในการฉีดก๊าซของพัลส์วาล์ว เวลา ในการเก็บข้อมูล และความไวของแมสสเปกโตรมิเตอร์ รวมทั้งการกำหนดคุณสมบัติในปฏิกรณ์ สามารถกำหนดโดยตรงผ่านคอมพิวเตอร์ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการเก็บข้อมูลของระบบมีทั้งการทำงานแบบ SCAN เพื่อใช้เก็บข้อมูลแถบสเปกตรัมของมวล (mass spectra) และแบบ TRANSIENT เพื่อเก็บข้อมูลที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาด้วยความเร็วสูง หลังจากการทดลองเสร็จสิ้นแล้ว สามารถนำข้อมูลแต่ละชุดมาวิเคราะห์ได้ ข้อมูลพัลส์ที่ได้แสดงในระบบพิกัด 3 มิติได้โดยอาศัยโปรแกรมสร้างโค้งเรียบเพื่อคำนวณหาพื้นที่ใต้โค้งและหาผลตอบสนองที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาของพัลส์ที่มีการถ่ายโอนแบบนุดเซน

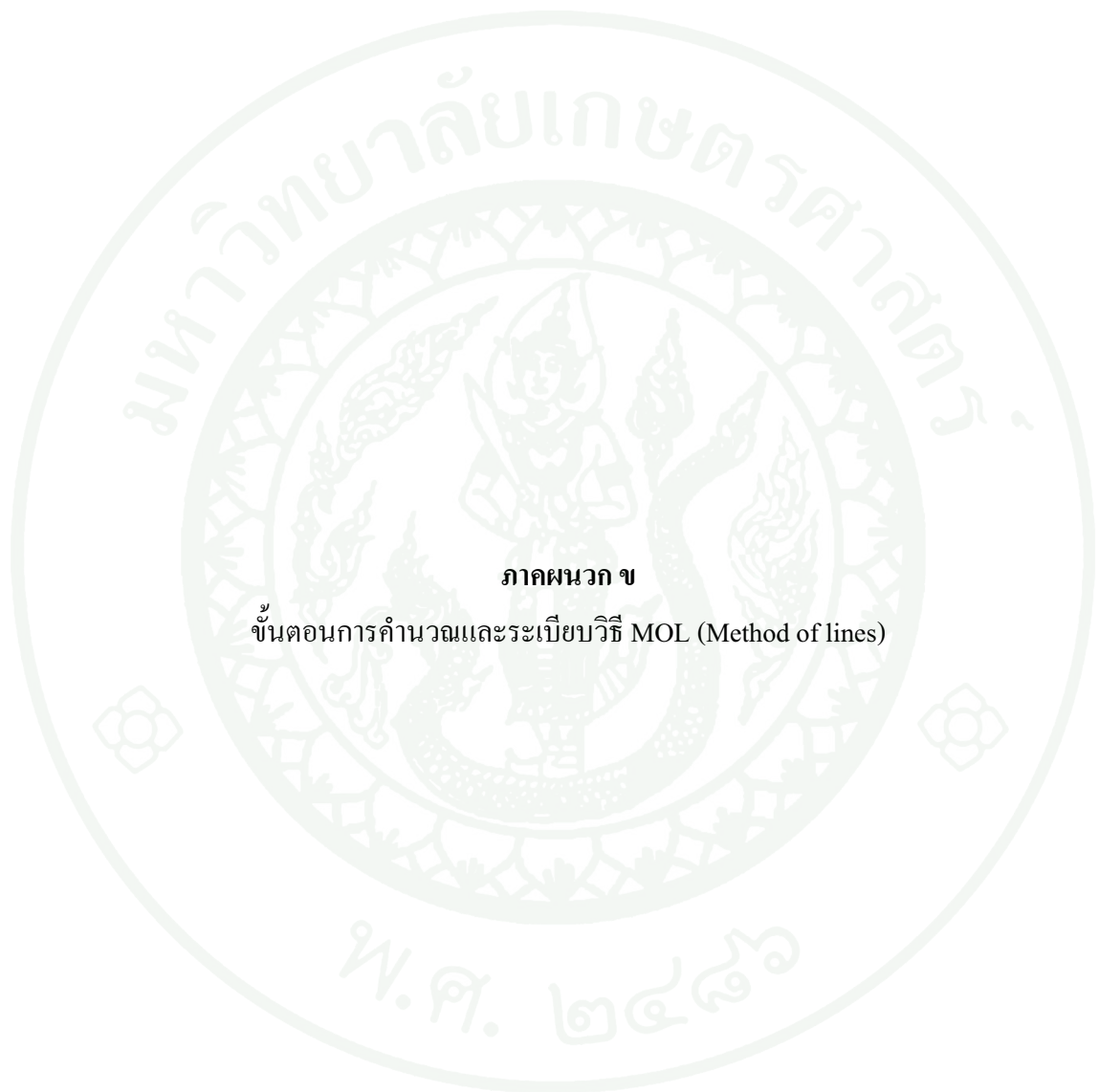


ภาพผนวกที่ ก4 ลักษณะผลตอบสนองแบบซึ่งแสดงชุดของการฉีดก๊าซและผลตอบสนองที่ได้จากแมสสเปกโตรมิเตอร์

ที่มา: Gleaves *et al.*, (1997)

การทดลองผลตอบสนองแทป

พิจารณาภาพผนวกที่ ก4 ซึ่งแสดงลักษณะการทดลองหาผลตอบสนองแทปที่มีการฉีดก๊าซต่อเนื่องจากวาล์วเดี่ยว (Single valve) ก๊าซที่ออกจากปฏิกิริยาจะถูกวัดด้วยเครื่องแมสสเปกโตรมิเตอร์ เมื่อพิจารณาจากแถบสเปกตรัมดังแสดงในภาพผนวกที่ ก4 พบว่าผลิตภัณฑ์แต่ละชนิดมีลักษณะของผลตอบสนองที่เปลี่ยนแปลงตามเวลาแตกต่างกันและเปลี่ยนไปตามจำนวนครั้งในการฉีด ในส่วนของก๊าซทำปฏิกิริยามีปริมาณเพิ่มขึ้นขณะที่ผลิตภัณฑ์ลดลง แต่สำหรับก๊าซเฉื่อยซึ่งมีปริมาณคงที่ตลอดการทดลอง ปริมาณของผลิตภัณฑ์แต่ละชนิดที่แตกต่างกันจะมีความสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงอัตราการแปลงผันของก๊าซทำปฏิกิริยาและอัตราการเกิดผลิตภัณฑ์ การเปลี่ยนแปลงดังกล่าวมีความสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงของตัวเร่งปฏิกิริยา เช่น การลดลงของพื้นผิวที่เกิดการเร่งปฏิกิริยา หรือพื้นผิวที่เกิดการเร่ง ปฏิกิริยาเสื่อมสภาพเนื่องจากการสะสมของคาร์บอนบนพื้นผิว



ภาคผนวก ข

ขั้นตอนการคำนวณและระเบียบวิธี MOL (Method of lines)

การสร้างความสัมพันธ์ตามจุดสำหรับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

ระเบียบวิธี MOL เป็นระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่สามารถนำมาประยุกต์หาผลเฉลยเชิงตัวเลขของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยในปัญหาค่าขอบ แนวความคิดของวิธีการเป็นการเปลี่ยนอนุพันธ์ย่อยทุกพจน์ ยกเว้นอนุพันธ์ย่อยที่เทียบกับเวลาให้เป็นความสัมพันธ์ของตัวแปรตามจุด (Discretized) สำหรับตัวแปรเวลายังคงความต่อเนื่องของสมการเชิงอนุพันธ์เช่นเดิม และหาผลเฉลยเชิงตัวเลขได้ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับปัญหาค่าเริ่มต้น

การวิจัยนี้การนำระเบียบวิธี MOL มาใช้หาผลเฉลยจำเป็นต้องมีความรู้ความเข้าใจในพื้นฐานของระเบียบวิธีผลต่างสืบเนื่อง เพื่อใช้ในการเปลี่ยนปัญหาค่าขอบให้เป็นระบบปัญหาค่าเริ่มต้น โดยอาศัยการประมาณอนุพันธ์ย่อยด้วยอนุกรมเทย์เลอร์ (Taylor series) เมื่อโดเมน Ω อยู่บนระนาบ $\xi - \tau$ และ $(\xi_i, \tau) \in \Omega$ ในขณะที่ $(\xi_i, \tau) = (\xi_0 + ih_\xi, \tau)$ จากอนุกรมเทย์เลอร์สำหรับฟังก์ชันต่อเนื่อง $\phi(\xi, \tau)$

$$\phi(\xi_{i+1}, \tau) = \phi(\xi_i, \tau) + h_\xi \frac{\partial \phi(\xi_i, \tau)}{\partial \xi} + \frac{h_\xi^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi(\xi_i, \tau)}{\partial \xi^2} + \dots \quad (\text{ข-1})$$

$$\phi(\xi_{i-1}, \tau) = \phi(\xi_i, \tau) - h_\xi \frac{\partial \phi(\xi_i, \tau)}{\partial \xi} + \frac{h_\xi^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi(\xi_i, \tau)}{\partial \xi^2} + \dots \quad (\text{ข-2})$$

การหาผลเฉลยเชิงตัวเลขของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการวิจัยนี้ทำโดยการประมาณอนุพันธ์ย่อยด้วยผลต่างแบบตรงกลาง และจากอนุกรมเทย์เลอร์ในสมการที่ (ข-1) และ (ข-2) สามารถแสดงอนุพันธ์ย่อยอันดับที่สองได้ดังนี้

ผลต่างแบบตรงกลาง สำหรับอนุพันธ์อันดับที่ 2

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \phi(\tau)}{\partial \tau^2} \right)_i &= \frac{\phi_{i+1}(\tau) - 2\phi_i(\tau) + \phi_{i-1}(\tau)}{h_\xi^2} - \frac{h_\xi^2}{12} \left(\frac{\partial^4 \phi(\tau)}{\partial \xi^4} \right)_i + \dots \\ \left(\frac{\partial^2 \phi(\tau)}{\partial \tau^2} \right)_i &\cong \frac{\phi_{i+1}(\tau) - 2\phi_i(\tau) + \phi_{i-1}(\tau)}{h_\xi^2} \end{aligned} \quad (\text{ข-3})$$

การประมาณอนุพันธ์ย่อยอันดับหนึ่งด้วยผลต่างแบบไปข้างหน้า จากอนุกรมเทย์เลอร์ในสมการที่ (ข-1) ได้ว่า

ผลต่างแบบไปข้างหน้า สำหรับอนุพันธ์อันดับที่ 1

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\phi(\tau)}{\partial\xi}\right)_i &= \frac{-\phi_{i+2}(\tau)+4\phi_{i+1}(\tau)-3\phi_i(\tau)}{2h_\xi} - \frac{h_\xi^2}{6}\left(\frac{\partial^3\phi(\tau)}{\partial\xi^3}\right)_i + \dots \\ \left(\frac{\partial\phi(\tau)}{\partial\xi}\right)_i &\cong \frac{-\phi_{i+2}(\tau)+4\phi_{i+1}(\tau)-3\phi_i(\tau)}{2h_\xi}\end{aligned}\quad (\text{ข-4})$$

การประมาณอนุพันธ์ย่อยอันดับที่หนึ่งด้วยผลต่างแบบย้อนกลับ จากอนุกรมเทย์เลอร์ในสมการที่ (ข-2) ได้ว่า

ผลต่างแบบย้อนกลับ สำหรับอนุพันธ์อันดับที่ 1

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial\phi(\tau)}{\partial\xi}\right)_i &= \frac{3\phi_i(\tau)-4\phi_{i-1}(\tau)+\phi_{i-2}(\tau)}{2h_\xi} - \frac{h_\xi^2}{6}\left(\frac{\partial^3\phi(\tau)}{\partial\xi^3}\right)_i + \dots \\ \left(\frac{\partial\phi(\tau)}{\partial\xi}\right)_i &\cong \frac{3\phi_i(\tau)-4\phi_{i-1}(\tau)+\phi_{i-2}(\tau)}{2h_\xi}\end{aligned}\quad (\text{ข-5})$$

เมื่อ h_ξ คือระยะห่างระหว่างพิกัดในแนวแกนของปฏิกรณ์ โดยการประมาณอนุพันธ์ย่อยอันดับที่สองด้วยผลต่างแบบตรงกลางจะมีค่าความผิดพลาดจากการตัดปลาย (Truncation error) เท่ากับ $O(h_\xi^2)$ หรืออาจกล่าวได้ว่าความผิดพลาดของการประมาณอนุพันธ์อันดับที่สองนี้ขึ้นกับกำลังสองของช่วงพิกัดในแนวแกน (ξ – stepsize, h_ξ) ดังนั้นแบบจำลองการทดลองผลตอบสนองแบบสามสามารถแสดงความสัมพันธ์ตามจุดของทั้งระบบสมการ โดยอาศัยการประมาณอนุพันธ์ย่อยอันดับที่สองดังแสดงในสมการที่ (ข-3) ร่วมกับหลักการของระเบียบวิธี MOL จะได้ระบบสมการความสัมพันธ์ตามจุดที่อธิบายพฤติกรรมที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์แบบ

การสร้างความสัมพันธ์ตามจุดของแบบจำลองการทดลองผลตอบสนองแบบ เพื่อให้ได้มาซึ่งผลเฉลยเชิงตัวเลขจำเป็นต้องสร้างความสัมพันธ์ตามจุดของทั้งสมการหลักที่ใช้ในการอธิบายระบบ และสมการของเงื่อนไขต่างๆ โดยในการวิจัยแบบจำลองผลตอบสนองแบบหนึ่งโซนและสามโซนตามลำดับ ดังนั้นเพื่อให้ง่ายต่อการทำความเข้าใจ จึงแบ่งการแสดงขั้นตอนการสร้างความสัมพันธ์ตามจุดไปตามลักษณะปฏิกรณ์ โดยในแต่ละปฏิกรณ์ถูกแสดงรายละเอียดของการสร้างความสัมพันธ์ตามจุดดังนี้

ความสัมพันธ์ตามจุดของแบบจำลองปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซน

ปฏิกรณ์แท่งหนึ่งโซนเมื่อบรรจุอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาไว้อย่างสม่ำเสมอไว้เต็มทั้งปฏิกรณ์ แล้วทำการฉีดก๊าซเฉื่อยผ่านไปยังปฏิกรณ์ ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นภายในปฏิกรณ์เป็นการแพร่เพียงอย่างเดียว

$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} \quad (\text{ข-6})$$

สภาวะเริ่มต้น และสภาวะขอบสำหรับปฏิกรณ์แท่งชนิดหนึ่งโซนเป็นดังนี้

$$\text{สภาวะเริ่มต้น :} \quad \tau = 0 \quad C^* = \delta(\xi - 0^+) \quad (\text{ข-7})$$

$$\text{สภาวะขอบ :} \quad \xi = 0 \quad \frac{\partial C^*}{\partial \xi} = 0 \quad (\text{ข-8})$$

$$\xi = 1 \quad C^* = 0 \quad (\text{ข-9})$$

ความสัมพันธ์ของอัตราการไหลขาออกของก๊าซ โมเมนต์อันดับศูนย์ของอัตราการไหลขาออกของก๊าซแบบไร้มิติ และค่าการแปลงผันของก๊าซแสดงได้ดังนี้

$$\text{อัตราการไหลขาออกของก๊าซแบบไร้มิติ :} \quad F^* = -\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} \quad (\text{ข-10})$$

$$\text{โมเมนต์อันดับศูนย์ :} \quad M_0^* = \int F^* d\tau \quad (\text{ข-11})$$

$$\text{การแปลงผันของก๊าซ :} \quad X = 1 - M_0^* \quad (\text{ข-12})$$

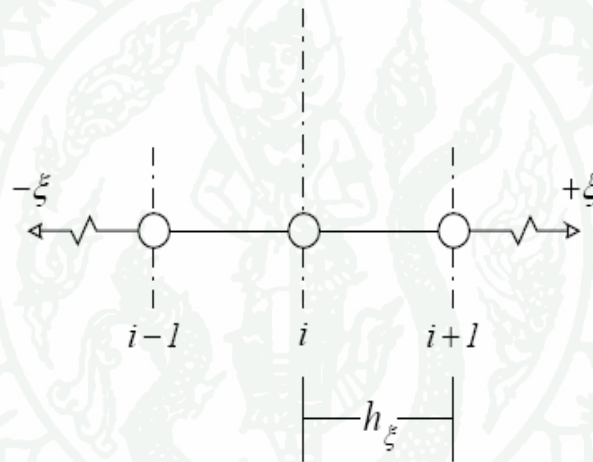
การจำลองแบบการทดลองผลตอบสนองแท่งจำเป็นต้องสร้างความสัมพันธ์ตามจุดเพื่อหาผลเฉลยเชิงตัวเลขที่พิกัดต่างๆ ของปฏิกรณ์ที่เวลาต่างๆ ดังนั้นการสร้างความสัมพันธ์ตามจุดของสมการอนุกรมมวล สำหรับการทดลองผลตอบสนองแท่งสร้างความสัมพันธ์ที่มีลักษณะแตกต่าง

กัน 3 กรณีคือ (1) ความสัมพันธ์ตามจุดสำหรับพิกัดในแนวแกนปฏิกิริยา (2) ความสัมพันธ์ตามจุดสำหรับสถานะเริ่มต้นและ (3) ความสัมพันธ์ตามจุดสำหรับสถานะขอบ

1. ความสัมพันธ์ตามจุดของพิกัดในแนวแกนปฏิกิริยา

สมการอนุรักษ์มวลไว้มิติของก๊าซทำปฏิกิริยา

$$\left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_i = \frac{C_{i+1}^* - 2C_i^* + C_{i-1}^*}{h_\xi^2} \quad (\text{ข-13})$$



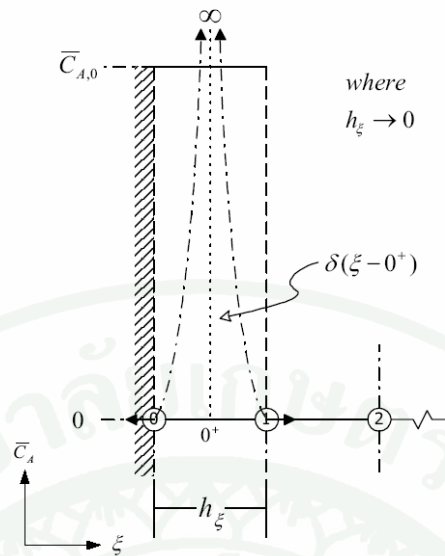
ภาพผนวกที่ ข1 ความสัมพันธ์ตามจุดของพิกัดในแนวแกนของปฏิกิริยาแบบ

2. ความสัมพันธ์ตามจุดของสถานะเริ่มต้น

สถานะเริ่มต้นของแบบจำลองของการทดลองผลตอบแทนแบบแสดงให้เห็นความสัมพันธ์ของความเข้มข้นของก๊าซมีลักษณะเป็นฟังก์ชันเดลตา ซึ่งเป็นไปได้ยากที่จะนำมาแปลความหมายในทางระเบียบวิธีเชิงตัวเลขได้โดยตรง ด้วยเหตุนี้จำเป็นต้องนิยามฟังก์ชันเดลตา มาแปลความหมายก่อนนำไปใช้ (Kreyszig, 1993)

โดยสมบัติ

$$\int C^* d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - 0^+) d\xi \equiv 1$$



ภาพผนวกที่ ข2 ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางเข้าของปฏิกรณ์แทปและฟังก์ชันเดลตา

จากนิยามพบว่าเมื่อกำหนดให้ความเข้มข้นของก๊าซที่ทางเข้าของปฏิกรณ์เท่ากับ ความเข้มข้นที่ตำแหน่งถัดมาจะได้สมการอินทิกรัล (Integral equation) สามารถอธิบายได้ด้วยพื้นที่ ภายในสี่เหลี่ยมที่มีความสูงเป็น $C_0^*(\tau=0)$ และความยาวด้านเท่ากับ h_ξ (พิจารณาภาพผนวกที่ ข 2) และจากนิยามของฟังก์ชันเดลตาได้ว่าที่ตำแหน่งอื่นๆ จะมีค่าความเข้มข้นเป็นศูนย์ ดังนั้นสามารถสรุปได้ในพจน์ของสมการเชิงฟังก์ชันที่อธิบายสภาวะเริ่มต้น

สภาวะเริ่มต้น :

$$C^*(\tau=0) = \begin{cases} \frac{1}{h_\xi} & \text{เมื่อ } 0 \leq \xi_i \leq h_\xi \\ 0 & \text{เมื่อ } h_\xi \leq \xi_i \leq 1 \end{cases} \quad (\text{ข-14})$$

3. ความสัมพันธ์ตามจุดของสภาวะขอบ

ทางเข้าของปฏิกรณ์ :

$$\left(\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \right)_{i=0} = \frac{C_1^* - C_0^*}{h_\xi} = 0 \quad (\text{ข-15})$$

$$\left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i=0} = \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i=1} \quad (\text{ข-16})$$

ทางออกของปฏิกรณ์ : $C^* = 0$ ดังนั้น $\left(\frac{dC^*}{d\tau} \right) = 0$ (ข-17)

ความสัมพันธ์ตามจุดของแบบจำลองปฏิกรณ์แบบชนิดสามโซน

ปฏิกรณ์แบบสามโซนประกอบด้วยเบคของอนุภาคเฉื่อยในโซนที่หนึ่งและโซนที่สาม ประกอบเบคของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาในโซนที่สอง สมการอนุกรมมวลแบบไรมิตซ์ของก๊าซที่แพร่ผ่านอนุภาคเฉื่อยแสดงความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

$$r_e \frac{\partial C^*}{\partial \tau} = r_D \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} \quad (\text{ข-18})$$

สมการอนุกรมมวลแบบไรมิตซ์ของก๊าซที่แพร่ผ่านเบคของอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาซึ่งบรรจุอยู่ภายในโซนที่สองถูกแสดงความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์ดังนี้

$$\frac{\partial C^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 C^*}{\partial \xi^2} - k^* C^* \quad (\text{ข-19})$$

สถานะเริ่มต้น : $\tau = 0,$ $C^* = \delta(\xi - 0^+)$ (ข-20)

สถานะขอบ : $\xi = 0,$ $\frac{\partial C^*}{\partial \xi} = 0$ (ข-21)

$\xi = 1,$ $C^* = 0$ (ข-22)

สถานะขอบที่พิกัดระนาบ ξ_1 : $C^*|_I = C^*|_{II}$ (ข-23)

$$-r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_I = -\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_{II} \quad (\text{ข-24})$$

สถานะขอบที่พิกัดระนาบ ξ_2 : $C^*|_{II} = C^*|_{III}$ (ข-25)

$$-\left.\frac{\partial C^*}{\partial \xi}\right|_{II} = -r_D \left.\frac{\partial C^*}{\partial \xi}\right|_{III} \quad (\text{ข-26})$$

อัตราการผลิตออกของก๊าซแบบไร้มิติ โมเมนต์อันดับศูนย์ของอัตราการผลิตออกแบบไร้มิติ และการแปลงผันของก๊าซมีความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์ดังนี้

อัตราการผลิตออกของก๊าซแบบไร้มิติ :
$$F^* = -r_D \left.\frac{\partial C^*}{\partial \xi}\right|_{\xi=1} \quad (\text{ข-27})$$

โมเมนต์อันดับศูนย์ :
$$M_0^* = \int_0^1 F^* d\tau \quad (\text{ข-28})$$

การแปลงผันของก๊าซ :
$$X = 1 - M_0^* \quad (\text{ข-29})$$

1. ความสัมพันธ์ตามจุดของพิกัดตามแนวแกนปฏิกรณ์

พิจารณาภาพผนวกที่ ข1 ความสัมพันธ์ตามจุดภายในเบดของอนุภาคเฉื่อยที่มีการแพร่เพียงอย่างเดียวสำหรับปฏิกรณ์แทปสามโซน (โซนที่หนึ่งและโซนที่สาม)

เมื่อ $0 < \xi_i < \xi_1$ และ $\xi_2 < \xi_i < 1$

การแพร่แบบนุดเซน :
$$r_\varepsilon \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right) = r_D \left(\frac{C_{i+1}^* - 2C_i^* + C_{i-1}^*}{h_\xi^2} \right) \quad (\text{ข-30})$$

สำหรับเบดอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา (โซนที่ 2) เป็นโซนที่เกิดปฏิกิริยาในปฏิกรณ์แทปสามโซน

เมื่อ $\xi_1 < \xi_i < \xi_2$

$$\left(\frac{dC^*}{d\tau} \right) = \frac{C_{i+1}^* - 2C_i^* + C_{i-1}^*}{h_\xi^2} - k^* C_i^* \quad (\text{ข-31})$$

2. ความสัมพันธ์ตามจุดของสถานะเริ่มต้น

เวลาเริ่มต้นที่ก๊าซเข้าสู่ปฏิกรณ์แบบสามโซนถูกอธิบายด้วยเคลตาฟังก์ชัน พิจารณาภาพผนวกที่ ข2

$$\text{สถานะเริ่มต้น : } \tau = 0, C_i^*(\tau = 0) = \begin{cases} \frac{1}{h_\xi} & \text{เมื่อ } 0 \leq \xi_i \leq h_\xi \\ 0 & \text{เมื่อ } h_\xi \leq \xi_i \leq 1 \end{cases} \quad (\text{ข-32})$$

3. ความสัมพันธ์ตามจุดของสถานะขอบ

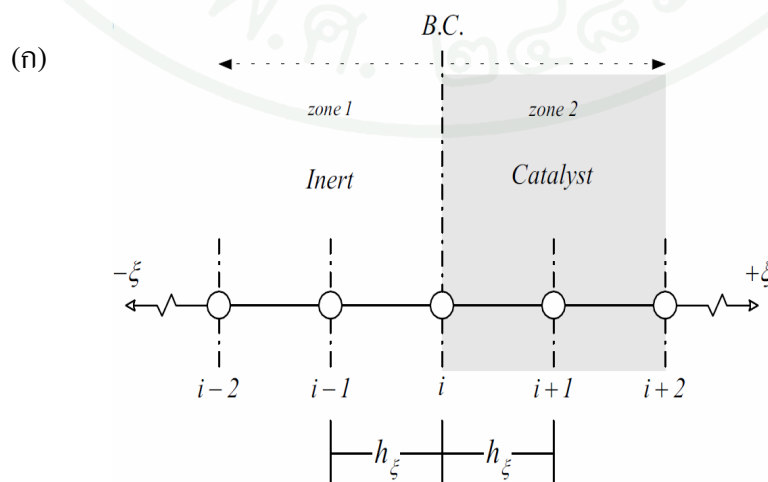
ความสัมพันธ์ตามจุดของสถานะขอบของการทดลองผลตอบแทนแบบชนิดสามโซน

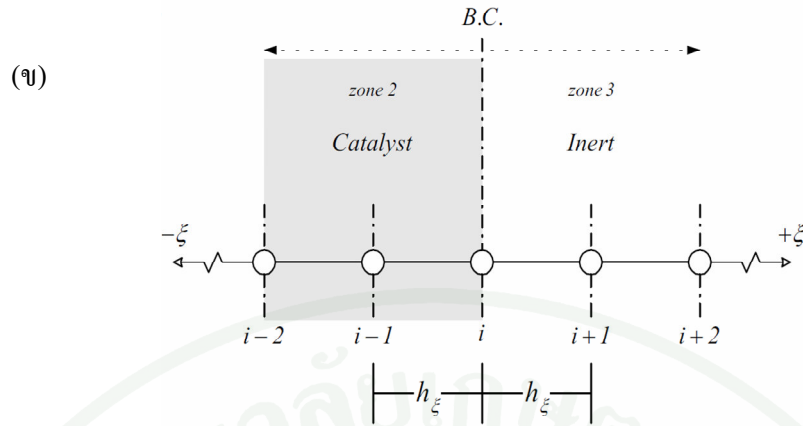
$$\text{ตำแหน่งทางเข้าของปฏิกรณ์:} \quad \left(\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \right)_{i=0} = \frac{C_1^* - C_0^*}{h_\xi} = 0$$

$$\text{ได้ว่า} \quad \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i=0} = \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i=1} \quad (\text{ข-33})$$

$$\text{เนื่องจากที่ทางออกของปฏิกรณ์ } C^* = 0 \text{ ดังนั้น } \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i=\text{outlet}} = 0 \quad (\text{ข-34})$$

สถานะขอบภายในปฏิกรณ์แบบสามโซนอธิบายโดยสมการที่ ข-4 และ ข-5 ความสัมพันธ์ตามจุดของสถานะขอบภายในปฏิกรณ์ถูกแสดงดังต่อไปนี้





ภาพผนวกที่ ข3 ความสัมพันธ์ตามจุดของสภาวะขอบภายในปฏิกรณ์แท่ง

(ก)สภาวะขอบที่ ξ_1 , (ข)สภาวะขอบที่ ξ_2

สภาวะขอบที่พิกัด ξ_1 :

$$-r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_I = -\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_{II}$$

$$-r_D \left(\frac{3C_i^* - 4C_{i-1}^* + 2C_{i-2}^*}{2h_\xi} \right) = - \left(\frac{-C_{i+2}^* + 4C_{i+1}^* - 3C_i^*}{2h_\xi} \right)$$

$$C_i^* = \frac{1}{3r_D + 3} (-C_{i+2}^* + 4C_{i+1}^* + 4r_D C_{i-1}^* - r_D C_{i-2}^*) \quad (\text{ข-35})$$

อัตราการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นไว้มิตของก๊าซทำปฏิกิริยาที่ระนาบพิกัด ξ_1

$$\left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_i = \frac{1}{3r_D + 3} \left[- \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i+2} + 4 \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i+1} + 4r_D \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i-1} - r_D \left(\frac{dC^*}{d\tau} \right)_{i-2} \right] \quad (\text{ข-36})$$

สภาวะขอบที่พิกัด ξ_2 :

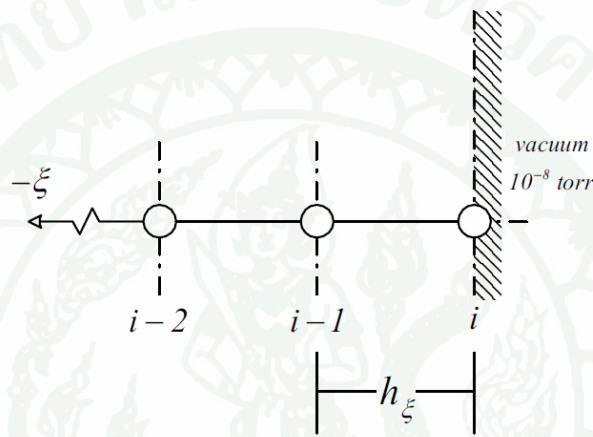
$$-\frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_{II} = -r_D \frac{\partial C^*}{\partial \xi} \Big|_{III}$$

เช่นเดียวกันกับที่สภาวะขอบที่พิกัด ξ_1 อัตราการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นไว้มิตของก๊าซทำปฏิกิริยาที่ระนาบพิกัด ξ_2 เป็นดังสมการต่อไปนี้

$$\left(\frac{dC^*}{d\tau}\right)_i = \frac{1}{3r_D + 3} \left[-\left(\frac{dC^*}{d\tau}\right)_{i+2} + 4\left(\frac{dC^*}{d\tau}\right)_{i+1} + 4r_D\left(\frac{dC^*}{d\tau}\right)_{i-1} - r_D\left(\frac{dC^*}{d\tau}\right)_{i-2} \right] \quad (\text{ข-37})$$

ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางออกของปฏิกรณ์

อัตราการไหลขาออกของก๊าซทั้งสำหรับปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซนและสามโซนเป็นดังสมการที่แสดง และสามารถแสดงได้ในพจน์ของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยอาศัยสมการที่ ข-5



ภาพผนวกที่ ข4 ความสัมพันธ์ตามจุดที่ทางออกของปฏิกรณ์แบบ

ทางออกของปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซน $C_{i=\text{outlet}}^* = 0$ ทำให้สมการอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซเป็นดังนี้

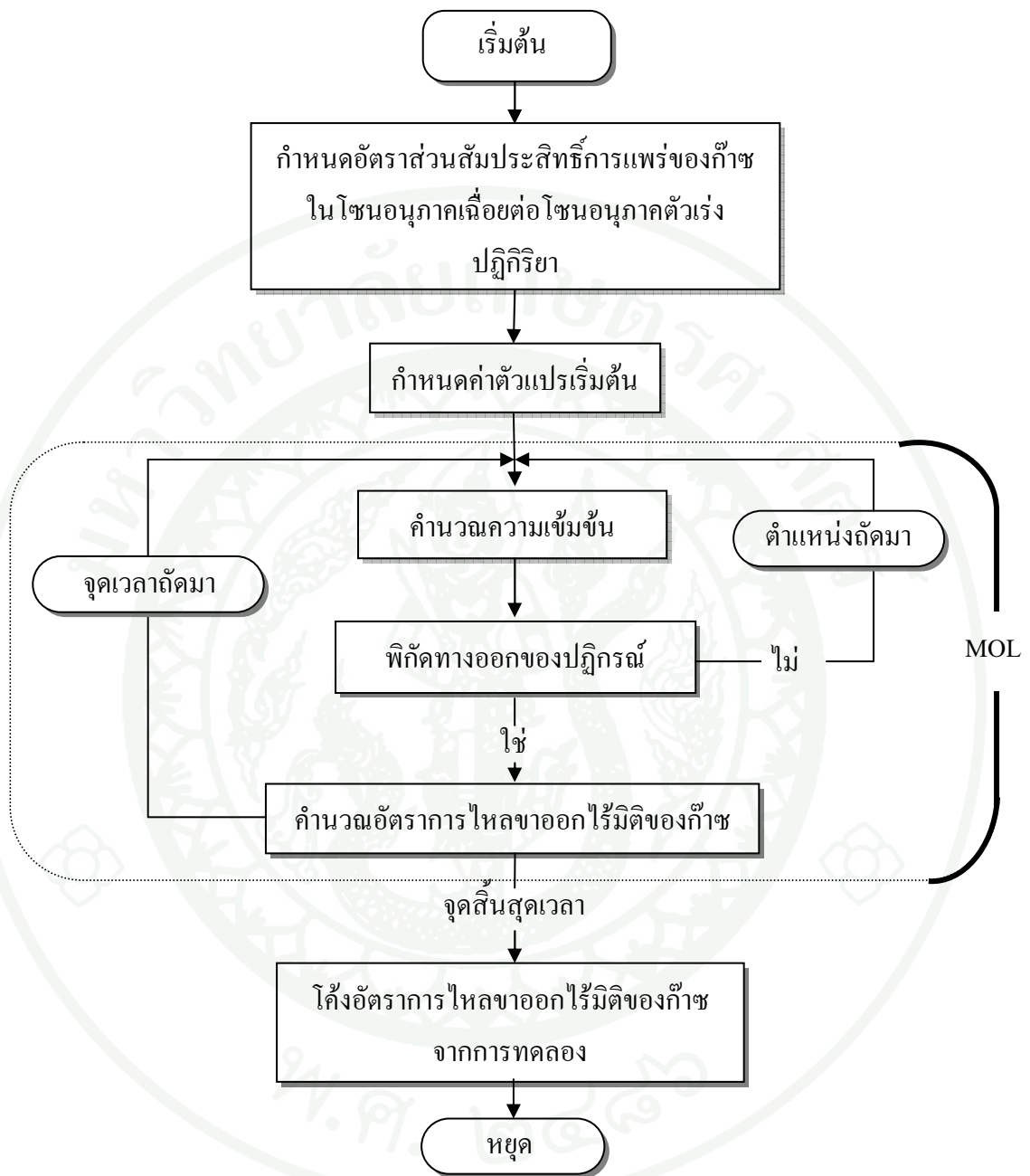
$$F^* = -\frac{3C_i^* - 4C_{i-1}^* + C_{i-2}^*}{2h_\xi} = \frac{1}{2h_\xi} (4C_{i-1}^* - C_{i-2}^*) \quad (\text{ข-38})$$

ทางออกของปฏิกรณ์แบบสามโซน $C_{i=\text{outlet}}^* = 0$ ทำให้สมการอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซเป็นดังนี้

$$F^* = -r_D \frac{3C_i^* - 4C_{i-1}^* + C_{i-2}^*}{2h_\xi} = \frac{r_D}{2h_\xi} (4C_{i-1}^* - C_{i-2}^*) \quad (\text{ข-39})$$

ขั้นตอนการคำนวณ

จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์พบว่า การอธิบายพฤติกรรมที่ปรากฏภายในปฏิกรณ์ทั้งสองชนิดด้วยสมการทางคณิตศาสตร์มีลักษณะแตกต่างกันเพียงเล็กน้อย กล่าวคือแบบจำลองที่อธิบายปรากฏการณ์ภายในปฏิกรณ์แบบสามโซนเสมือนกับการใช้แบบจำลองปฏิกรณ์แบบชนิดหนึ่งโซนในการวิเคราะห์ปรากฏการณ์ทั้งหมดตามครั้งต่อเนื่องกัน ฉะนั้นขั้นตอนการคำนวณโดยรวมของการจำลองแบบสำหรับทั้งสองกรณีจึงเหมือนกันซึ่งแสดงได้ในภาพผนวกที่ ข5 การคำนวณเริ่มจากการกำหนดอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาและค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาของระบบ ต่อจากนั้นจึงหาผลเฉลยของอนุพันธ์ย่อยของแบบจำลองด้วยระเบียบวิธี MOL ดังที่ได้อธิบายในหัวข้อที่ผ่านมา ผลลัพธ์ที่ได้จากการหาผลเฉลยจะเป็นค่าเชิงตัวเลขของความเข้มข้นซึ่งเป็นฟังก์ชันกับพิกัดเวลาและพิกัดระยะทางไร้มิติตามแนวแกนปฏิกรณ์ เมื่อสิ้นสุดการคำนวณในแต่ละจุดเวลา ความเข้มข้นของก๊าซที่ตำแหน่งทางออกของปฏิกรณ์ถูกนำมาคำนวณหาอัตราการผลิตของก๊าซโดยใช้ความสัมพันธ์ระหว่างอัตราการผลิตของก๊าซและความเข้มข้นของก๊าซทำปฏิกิริยาเทียบกับพิกัดระยะทางในแนวแกน



ภาพผนวกที่ ข5 แผนภาพขั้นตอนการจำลองแบบโค้งอัตราการไหลขาออกไร้มิติของก๊าซกรณีที่มี
การแพร่เพียงอย่างเดียว



ภาคผนวก ค

ผลลัพธ์เชิงตัวเลขของค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา

ตารางผนวกที่ ค1 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์ ; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0259	0.0425	0.6383	0.0722	0.2030	1.8114	0.2064	0.1922	-0.0686
0.10	0.2841	0.3017	0.0621	0.7919	0.7910	-0.0011	2.2695	2.2562	-0.0059
0.20	0.6353	0.6498	0.0227	1.7788	1.7707	-0.0046	5.1038	5.0858	-0.0035
0.30	1.0801	1.0840	0.0028	3.0431	3.0165	-0.0087	8.7435	8.7103	-0.0038
0.40	1.6647	1.6416	-0.0138	4.7208	4.6543	-0.0141	13.5888	13.5190	-0.0051
0.50	2.4635	2.3860	-0.0314	7.0542	6.9048	-0.0212	20.3579	20.2068	-0.0074
0.60	3.6235	3.4542	-0.0522	10.5218	10.1943	-0.0311	30.14447	30.1447	-0.0110
0.70	5.4657	5.0326	-0.0792	16.2166	15.4697	-0.0460	47.2676	46.4704	-0.0169
0.80	8.8605	7.8250	-0.1169	27.3067	25.3597	-0.0713	80.5376	78.2985	-0.02780
0.90	17.4019	14.2925	-0.1787	58.4638	51.1520	-0.1251	178.0159	168.0966	-0.0557
0.99	80.8683	54.7268	-0.3233	395.3509	264.5394	-0.3309	1544.5377	1165.0830	-0.2457

ตารางผนวกที่ ค2 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.500

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0363	0.0440	0.2099	0.1063	0.0981	-0.0768	0.3081	0.2729	-0.1142
0.10	0.3974	0.4047	0.0186	1.1674	1.1574	-0.0086	3.3877	3.3532	-0.0102
0.20	0.8868	0.8895	0.0030	2.6204	2.6019	-0.0070	7.6164	7.5765	-0.0052
0.30	1.5048	1.4948	-0.0067	4.4786	4.4394	-0.0088	13.0404	12.9864	-0.0044
0.40	2.3100	2.2730	-0.0160	6.9391	6.8562	-0.0120	20.2635	20.1650	-0.0049
0.50	3.4034	3.3128	-0.0266	10.3515	10.1786	-0.0167	30.3392	30.1505	-0.0062
0.60	4.9762	4.7790	-0.0396	15.4016	15.0011	-0.0260	45.3836	44.9922	-0.0086
0.70	7.4400	7.0181	-0.0567	23.6435	22.8358	-0.0342	70.2761	69.3811	-0.0127
0.80	11.8894	10.9286	-0.0808	39.5205	37.4661	-0.0520	119.3989	116.9451	-0.0206
0.90	22.7028	19.9837	-0.1198	83.0687	76.6261	-0.0776	261.8069	251.1713	-0.0406
0.99	96.6626	76.2438	-0.9921	506.8972	390.3095	-0.2300	2105.7328	1738.4436	-0.1744

ตารางผนวกที่ ค3 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0454	0.0435	-0.0433	0.1394	0.1188	-0.1472	0.4087	0.3444	-0.1574
0.10	0.4962	0.4932	-0.0060	1.5295	1.5075	-0.0144	4.4929	4.4286	-0.0143
0.20	1.1055	1.0978	-0.0070	3.4309	3.3895	-0.0121	10.0986	10.0292	-0.0069
0.30	1.8720	1.8533	-0.0100	5.8587	5.7906	-0.0116	17.2892	17.2040	-0.0049
0.40	2.8660	2.8255	-0.0141	9.0668	8.9495	-0.0129	26.8473	26.7258	-0.0045
0.50	4.2083	4.1258	-0.0196	13.5041	13.2941	-0.0155	40.1730	39.9729	-0.0050
0.60	6.1248	5.9609	-0.0268	20.0462	19.6515	-0.0197	60.0415	59.6671	-0.0062
0.70	9.0970	8.7660	-0.0364	30.6628	29.8586	-0.0262	92.8417	92.0393	-0.0086
0.80	14.3877	13.6667	-0.0501	50.9197	49.0178	-0.0374	157.3063	155.1950	-0.0134
0.90	26.9488	25.0260	-0.0714	105.3742	98.9825	-0.0606	342.3519	333.4582	-0.0260
0.99	108.5711	95.0204	-0.1248	597.1236	509.7322	-0.1464	2589.8054	2304.9567	-0.1100

ตารางผนวกที่ ๑๔ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0726	0.0577	-0.2058	0.2605	0.1845	-0.2916	0.7989	0.5487	-0.3132
0.10	0.7906	0.7805	-0.0128	2.8540	2.7839	-0.0246	8.7752	8.5238	-0.0286
0.20	1.7538	1.7538	5.40421E-05	6.3864	6.3305	-0.0087	19.7051	19.4635	-0.0123
0.30	2.9540	2.9724	0.0062	10.8722	10.8540	-0.0017	33.6948	33.4814	-0.0063
0.40	4.4932	4.5438	0.0112	16.7590	16.8112	0.0031	52.2390	52.0963	-0.0027
0.50	6.5431	6.6502	0.0164	24.8280	25.0197	0.0077	77.9954	78.0125	0.0002
0.60	9.4193	9.6289	0.0222	36.5776	37.0566	0.0131	116.1921	116.5769	0.0033
0.70	13.7798	14.1887	0.0297	55.3029	56.4285	0.0204	178.7284	180.0408	0.0073
0.80	21.3026	22.1512	0.0398	90.0053	92.8559	0.0317	299.8521	304.0154	0.0139
0.90	38.3336	40.4738	0.0558	178.2003	187.7504	0.0536	636.0356	654.1806	0.0285
0.99	138.7213	151.7951	0.0942	850.7948	958.0484	0.1261	4073.5079	4500.3428	0.1048

ตารางผนวกที่ ค5 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0778	0.0669	-0.1404	0.2885	0.2006	-0.3047	0.8840	0.5832	-0.3477
0.10	0.8467	0.8441	-0.0031	3.1591	3.0956	-0.0201	9.8186	9.5067	-0.0318
0.20	1.8768	1.8908	0.0074	7.0653	7.0161	-0.0070	22.0433	21.7472	-0.0134
0.30	3.1586	3.2019	0.0137	12.0200	12.0299	0.0008	37.6821	37.4362	-0.0065
0.40	4.7995	4.8930	0.0195	18.5124	18.6384	0.0068	58.3984	58.2716	-0.0022
0.50	6.9800	7.1604	0.0258	27.3944	27.7477	0.0129	87.1462	87.2843	0.0016
0.60	10.0312	10.3676	0.0335	40.2946	41.1115	0.0203	129.7253	130.4661	0.0057
0.70	14.6415	15.2773	0.0434	60.7781	62.6281	0.0304	199.3032	201.5493	0.0113
0.80	22.5591	23.8480	0.0571	98.5248	103.0983	0.0464	333.6208	340.4509	0.0205
0.90	40.3658	43.5480	0.0788	193.4875	208.4715	0.0774	703.7325	732.8239	0.0413
0.99	143.9505	162.8776	0.1315	898.9499	1061.4101	0.1807	4373.6018	5035.6848	0.1514

ตารางผนวกที่ ๑๖ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0908	0.1054	0.1605	0.3671	0.2569	-0.3003	1.1728	0.6548	-0.4417
0.10	0.9864	1.0229	0.0370	4.0159	3.9373	-0.0196	12.8735	12.3567	-0.0401
0.20	2.1831	2.2596	0.0350	8.9685	8.9666	-0.0002	28.8825	28.4131	-0.0162
0.30	4.3352	4.4400	0.02418	15.2304	15.3802	0.0100	49.3323	48.9994	-0.0067
0.40	6.0887	6.3739	0.0468	23.4031	23.8416	0.0187	76.3698	76.3495	-0.0003
0.50	8.0609	8.4923	0.0535	34.5270	35.5174	0.0287	113.7939	114.4538	0.0058
0.60	11.5414	12.2884	0.0647	50.5743	60.8942	0.2040	169.0258	171.2058	0.0129
0.70	16.7613	18.0985	0.0798	75.8147	80.3039	0.0592	258.7934	264.7041	0.0228
0.80	25.6383	28.2290	0.1010	121.6683	132.3100	0.0875	430.5072	447.5665	0.0396
0.90	43.3205	51.4429	0.1351	234.2149	267.4876	0.1420	894.5402	964.2623	0.0779
0.99	156.6196	191.0628	0.2199	1021.7163	1353.2029	0.3244	5163.5654	6604.5065	0.2790

ตารางผนวกที่ ๗ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์
สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเนื้อต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์ ; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.1089	0.2119	0.9452	0.5047	0.4295	-0.1489	1.7040	0.6916	-0.5941
0.10	1.1818	1.3410	0.1347	5.5111	5.5435	0.0059	18.6883	17.7005	-0.0528
0.20	2.6106	2.8635	0.0969	12.2788	12.5386	0.0212	41.8772	41.0491	-0.0198
0.30	4.3752	4.7727	0.0908	20.7919	21.4709	0.0327	71.4177	71.0033	-0.0058
0.40	6.6147	7.2375	0.0942	31.8330	33.2721	0.0452	110.3382	110.8304	0.0045
0.50	9.5601	10.5447	0.1030	46.7421	49.5822	0.0608	163.9622	166.3746	0.0147
0.60	13.6301	15.2226	0.1168	68.0288	73.5750	0.0815	242.5984	249.2076	0.0272
0.70	19.6836	22.3738	0.1367	101.0439	112.2912	0.1113	369.2018	385.8842	0.0452
0.80	29.8672	34.8143	0.1656	159.8123	185.1294	0.1584	607.6327	635.5976	0.0460
0.90	52.0974	63.1839	0.2128	299.3456	373.7149	0.2484	1232.1466	1410.1912	0.1445
0.99	173.9247	232.2486	0.3353	1206.1112	1869.4686	0.5500	6416.6893	9600.0152	0.4961

ตารางผนวกที่ ๑๘ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกไว้มิติที่ถูก
 นอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา
 เท่ากับ 0.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0259	-0.0220	-1.8475	0.0722	0.0117	-0.8383	0.2064	0.0302	-0.8537
0.10	0.2841	0.2548	-0.1032	0.7918	0.7481	-0.0553	2.2695	2.1287	-0.0620
0.20	0.6353	0.6319	-0.0054	1.7788	1.7590	-0.0111	5.1038	4.9729	-0.0256
0.30	1.0809	1.1108	0.0277	3.0431	3.0554	0.0041	8.7435	8.6250	-0.0135
0.40	1.6647	1.7386	0.0444	4.7207	4.7780	0.0121	13.5888	13.4862	-0.0076
0.50	2.4635	2.5966	0.0541	7.0542	7.1776	0.0175	20.3579	20.2756	-0.0040
0.60	3.6236	3.8377	0.0591	10.5218	10.7490	0.0216	30.4801	30.4241	-0.0018
0.70	5.4657	5.7868	0.0588	16.2166	16.6214	0.0250	47.2676	47.2413	-0.0006
0.80	8.8605	9.2794	0.0473	27.3067	28.0407	0.0270	80.5376	80.5992	0.0008
0.90	17.4019	17.3862	-0.0009	58.4638	59.4762	0.0173	178.0159	177.1057	-0.0051
0.99	80.8683	57.6879	-0.2866	395.3509	284.4203	-0.2806	1544.5377	1237.8936	-0.1985

ตารางผนวกที่ ๑๑ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่อุณหภูมิ
 นอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้โค้งเท่ากับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยา
 เท่ากับ 0.5000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0363	-0.0120	-1.3300	0.1063	0.0161	-0.8488	0.3081	0.0670	-0.7827
0.10	0.3974	0.3645	-0.0826	1.1674	1.0911	-0.0653	3.3877	3.1433	-0.0725
0.20	0.8868	0.8750	-0.0134	2.6204	2.5636	-0.0217	7.6165	7.3654	-0.0330
0.30	1.5048	1.5191	0.0095	4.4787	4.4470	-0.0071	13.0438	12.7808	-0.0202
0.40	2.3100	2.3568	0.0203	6.9391	6.9409	0.0002	20.2635	19.9784	-0.0141
0.50	3.4034	3.4913	0.0258	10.3515	10.3991	0.0046	30.3392	30.0108	-0.0108
0.60	4.9762	5.1135	0.0276	15.4016	15.5133	0.0072	45.3836	44.9627	-0.0093
0.70	7.4400	7.6256	0.0249	23.6435	23.8420	0.0084	70.2761	69.6245	-0.0093
0.80	11.8894	12.0520	0.0137	39.5205	39.7798	0.0067	119.3989	117.9850	-0.0118
0.90	22.7028	22.1706	-0.0234	83.0687	82.3046	-0.0092	261.8069	255.5600	-0.0239
0.99	96.6626	75.2141	-0.2219	506.8972	380.8774	-0.2486	2105.7328	1623.7500	-0.2289

ตารางผนวกที่ ๑๑ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่อุณหภูมิ 1500°C ให้พื้นที่ได้ใกล้เคียงกับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0454	-0.0036	-1.0783	0.1394	0.0160	-0.8850	0.4087	0.0587	-0.8564
0.10	0.4962	0.4562	-0.0807	1.5295	1.4111	-0.0774	4.4929	4.1200	-0.0830
0.20	1.1055	1.0770	-0.0258	3.4309	3.3185	-0.0328	10.0986	9.6895	-0.0405
0.30	1.8720	1.8569	-0.0080	5.8587	5.7522	-0.0182	17.2892	16.8253	-0.0268
0.40	2.8660	2.8661	5.08215E-05	9.0668	8.9649	-0.0112	26.8473	26.2956	-0.0205
0.50	4.2083	4.2242	0.0038	13.5041	13.4016	-0.0076	40.1730	39.4699	-0.0175
0.60	6.1247	6.1519	0.0044	20.0462	19.9275	-0.0060	60.0415	59.0487	-0.0165
0.70	9.0970	9.1118	0.0016	30.6628	30.4640	-0.0065	92.8417	91.1988	-0.0177
0.80	14.3877	14.2805	-0.0074	50.9197	50.3652	-0.0109	157.3063	153.7420	-0.0226
0.90	26.9488	26.0321	-0.0340	105.3742	102.2183	-0.0300	342.3519	328.3440	-0.0409
0.99	108.5711	90.3638	-0.1677	597.1236	465.1306	-0.2210	2589.8054	1937.2200	-0.2520

ตารางผนวกที่ ค11 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่
 ถูกนอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้ใกล้เคียงกับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่ง
 ปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์; L_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0726	-0.0177	-1.2434	0.2605	-0.0486	-1.1865	0.7990	-0.1364	-1.1708
0.10	0.7904	0.6773	-0.1433	2.8540	2.4694	-0.13487	8.7752	7.6595	-0.1271
0.20	1.7538	1.6089	-0.0826	6.3864	5.8905	-0.0776	19.7051	18.3162	-0.0705
0.30	2.9540	2.7688	-0.0627	10.8722	10.2218	-0.0598	33.6948	31.9130	-0.0529
0.40	4.4932	4.2552	-0.0530	16.7590	15.8842	-0.0522	52.2390	49.8619	-0.0455
0.50	6.5431	6.2334	-0.0473	24.8280	23.6066	-0.0492	77.9954	74.6508	-0.0429
0.60	9.4193	9.0083	-0.0436	36.5776	34.7753	-0.0493	116.1921	111.1140	-0.0437
0.70	13.7798	13.2179	-0.0408	55.3029	52.4013	-0.0525	178.7284	170.0550	-0.0485
0.80	21.3026	20.5005	-0.0376	90.0053	84.5699	-0.0604	299.8521	281.6280	-0.0608
0.90	38.3336	37.1369	-0.0312	178.2003	164.1067	-0.0791	636.0356	574.9850	-0.0960
0.99	138.7213	139.4989	0.0056	850.7948	743.5247	-0.1261	4073.5079	2822.8400	-0.3070

ตารางผนวกที่ ๑๒ ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่
 ถูกอนุมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้ใกล้เคียงกับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่ง
 ปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกิริยา; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0778	-0.0326	-1.4184	0.2885	-0.0839	-1.2907	0.8940	-0.2261	-1.253
0.10	0.8467	0.7063	-0.1658	3.1591	2.6829	-0.1508	9.8186	8.4602	-0.1384
0.20	1.8768	1.6959	-0.0964	7.0653	6.4377	-0.0888	22.0433	20.3251	-0.0779
0.30	3.1586	2.9267	-0.0734	12.0200	11.1838	-0.0696	37.6821	35.4490	-0.0593
0.40	4.7995	4.5023	-0.0619	18.5124	17.3765	-0.0614	58.3984	55.3884	-0.0515
0.50	6.9800	6.5970	-0.0549	27.3944	25.8020	-0.0581	87.1462	82.8807	-0.0489
0.60	10.0312	9.5888	-0.0441	40.2946	37.9500	-0.0582	129.7253	123.2270	-0.0501
0.70	14.6415	13.9816	-0.0451	60.7781	57.0438	-0.0614	199.3032	188.2160	-0.0556
0.80	22.5591	21.6801	-0.0390	98.5248	91.6995	-0.0693	333.6208	310.5150	-0.0692
0.90	40.3659	39.3200	-0.0259	193.4875	176.7856	-0.0863	703.7325	628.2272	-0.1073
0.99	143.9505	150.2067	0.0435	898.9499	805.5690	-0.1039	4373.6018	2992.9075	-0.3157

ตารางผนวกที่ ค13 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่
 ถูกนอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้ใกล้เคียงกับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่ง
 ปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0908	-0.0957	-2.0543	0.3671	-0.2373	-1.6464	1.1728	-0.5927	-1.5054
0.10	0.9864	0.7530	-0.2366	4.0159	3.2120	-0.2002	12.8735	10.6575	-0.1721
0.20	2.1831	1.8880	-0.1352	8.9685	7.8772	-0.1217	28.8825	25.9918	-0.10018
0.30	4.3352	3.9326	-0.0929	15.2304	13.7512	-0.0971	49.3323	45.4841	-0.0780
0.40	6.0887	5.6032	-0.0797	23.4031	21.3787	-0.0865	76.3698	76.3698	5.7E-11
0.50	8.0609	7.4880	-0.0711	34.5270	31.6955	-0.0820	113.7939	106.2369	-0.0664
0.60	11.5414	10.8330	-0.0614	50.5743	46.4610	-0.0813	169.0258	157.4799	-0.0683
0.70	16.7613	15.9024	-0.0512	75.8147	69.4499	-0.0840	258.7934	239.2390	-0.0756
0.80	25.6383	23.6940	-0.0758	121.6683	110.6732	-0.0904	430.5072	390.6766	-0.0925
0.90	45.3205	45.0368	-0.0063	234.2149	210.5276	-0.1011	894.5402	772.1872	-0.1368
0.99	156.6196	180.0517	0.1496	1021.7163	981.9780	-0.0389	5163.5654	3432.6220	-0.3352

ตารางผนวกที่ ค14 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์โดยวิธีการเทียบโค้งอัตราการผลิตไฮโดรเจนออกไซด์ที่
 ถูกนอมัลไลซ์ให้พื้นที่ได้ใกล้เคียงกับหนึ่ง สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเฉื่อยต่อโซนอนุภาคตัวเร่ง
 ปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.1089	-0.2672	-3.4532	0.5047	-0.7470	-2.4802	1.7040	-1.7550	-2.0299
0.10	1.1818	0.7393	-0.3744	5.5111	3.8426	-0.3028	18.6883	14.2012	-0.2401
0.20	2.6106	2.0841	-0.2016	12.27.88	10.0235	-0.1837	41.8772	35.8751	-0.1433
0.30	4.3752	3.7529	-0.1422	20.7919	17.7625	-0.1457	71.4177	63.2891	-0.1138
0.40	6.6147	5.8843	-0.1104	31.8330	27.7465	-0.1284	110.3382	99.0837	-0.1020
0.50	9.5600	8.7137	-0.0885	46.7421	41.1464	-0.1197	163.9622	147.8115	-0.0985
0.60	13.6302	12.6784	-0.0700	68.0288	60.1472	-0.1159	242.5984	218.0837	-0.1010
0.70	19.6837	18.7064	-0.0500	101.0439	89.4058	-0.1152	369.2018	328.4380	-0.1104
0.80	29.8672	29.2413	-0.0210	159.8123	141.2232	-0.1163	607.6327	527.8585	-0.1313
0.90	52.0974	54.1028	0.0385	299.3456	265.6213	-0.1127	1232.1466	1008.4460	-0.1816
0.99	173.9247	233.4785	0.3424	1206.1112	1313.1840	0.0888	6416.6893	4119.8932	-0.3579

ตารางผนวกที่ ค15 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบคตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวทั้งปฏิกิริยา; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0259	0.0262	0.0096	0.0713	0.0713	-0.0002	0.2022	0.2022	-7.088E-05
0.10	0.2841	0.2826	-0.0053	0.7918	0.7901	-0.0022	2.2695	2.2677	-0.0008
0.20	0.6353	0.6280	-0.0116	1.7788	1.7700	-0.0049	5.1038	5.0947	-0.0018
0.30	1.0809	1.0601	-0.0192	3.0431	3.0177	-0.0083	8.7435	8.7169	-0.0030
0.40	1.6647	1.6168	-0.0288	4.7207	4.6603	-0.0128	13.5888	13.5249	-0.0047
0.50	2.4635	2.3623	-0.0411	7.0542	6.9214	-0.0188	20.3579	20.2151	-0.0070
0.60	3.6236	3.4156	-0.0574	10.5218	10.2327	-0.0275	30.4801	30.1626	-0.0104
0.70	5.4657	5.0270	-0.0803	16.2166	15.5538	-0.0409	47.2676	46.5145	-0.0159
0.80	8.8605	7.8408	-0.1151	27.3067	25.5447	-0.0645	80.5376	78.4081	-0.0264
0.90	17.4019	14.3270	-0.1767	58.4638	51.5600	-0.118	178.0159	168.3380	-0.0544
0.99	80.8683	53.9680	-0.3326	395.3509	263.7965	-0.3328	1544.5377	1158.2281	-0.2501

ตารางผนวกที่ ค16 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.500

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0363	0.0363	-0.0003	0.1063	0.1063	-0.0001	3.3126	3.3107	-0.0006
0.10	0.3974	0.3959	-0.0035	1.1674	1.1655	-0.0016	3.3877	3.3857	-0.0006
0.20	0.8868	0.8799	-0.0078	2.6204	2.6110	-0.0036	7.6165	7.6064	-0.0013
0.30	1.5048	1.4854	-0.0129	4.4786	4.4514	-0.0061	13.0438	13.0143	-0.0022
0.40	2.3010	2.2654	-0.0193	6.9391	6.8745	-0.0093	20.2635	20.1926	-0.0035
0.50	3.4034	3.3100	-0.0274	10.3515	10.2097	-0.0137	30.3392	30.1812	-0.0052
0.60	4.9762	4.7860	-0.0382	15.4016	15.0943	-0.0199	45.3836	45.0329	-0.0077
0.70	7.4400	7.0438	-0.0532	23.6435	22.9435	-0.0296	70.2761	69.4462	-0.0118
0.80	11.8894	10.9865	-0.0759	39.5205	37.6811	-0.0465	119.3989	117.0634	-0.0196
0.90	22.7028	20.0749	-0.1157	83.0687	76.0566	-0.0844	261.8069	251.3289	-0.0400
0.99	96.6626	75.6204	-0.2177	506.8972	389.1272	-0.2323	2105.7328	1729.2342	-0.1788

ตารางผนวกที่ 17 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.667

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0454	0.0454	-0.0002	0.1253	0.1253	-8.5868E-05	0.4046	0.4046	-3.47E-05
0.10	0.4962	0.4952	-0.0020	1.5295	1.5279	-0.0010	4.4929	4.4911	-0.0004
0.20	1.1055	1.1000	-0.0050	3.4309	3.4229	-0.0023	10.0986	10.0898	-0.0009
0.30	1.8720	1.8579	-0.0075	5.8587	5.8356	-0.0039	17.2892	17.2633	-0.0015
0.40	2.8660	2.8354	-0.0107	9.0668	9.0121	-0.0060	26.8473	26.7853	-0.0023
0.50	4.2083	4.1396	-0.0163	13.5041	13.3845	-0.0088	40.1730	40.0350	-0.0034
0.60	6.1247	6.0034	-0.0198	20.0462	19.7880	-0.0129	60.0415	59.7357	-0.0051
0.70	9.0970	8.7962	-0.0331	30.6628	30.0779	-0.0191	92.8417	92.1197	-0.0078
0.80	14.3877	13.8000	-0.0408	50.9197	49.3982	-0.0299	157.3063	155.2835	-0.01286
0.90	26.9488	25.1270	-0.0676	105.3742	99.7067	-0.0538	342.3519	333.38548	-0.0262
0.99	108.5711	95.8290	-0.1174	597.1236	510.1282	-0.1457	2589.8054	2293.8141	-0.1143

ตารางผนวกที่ ค18 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.333

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0726	0.0728	0.0018	0.2342	0.2342	7.8494E-05	0.7989	0.7989	3.4344E-05
0.10	0.7906	0.7918	0.0015	2.8540	2.8567	0.0009	8.7752	8.778	0.0004
0.20	1.7538	1.7597	0.0034	6.3864	6.3998	0.0021	19.7051	19.7217	0.0008
0.30	2.9540	2.9723	0.0062	10.8722	10.91080	0.0035	33.6948	33.7434	0.0014
0.40	4.4932	4.5323	0.0087	16.7590	16.8498	0.0054	52.2390	52.3553	0.0023
0.50	6.5431	6.6398	0.0148	24.8280	25.0249	0.0079	77.9954	78.2534	0.0033
0.60	9.4193	9.5782	0.0169	36.5776	36.9974	0.0115	116.1921	116.7606	0.0049
0.70	13.7798	14.0907	0.0226	55.3029	56.2365	0.0169	178.7284	180.0592	0.0074
0.80	21.3026	21.9726	0.0314	90.0053	92.3592	0.0262	299.8521	303.5204	0.0122
0.90	38.3336	40.2182	0.0492	178.2003	186.4206	0.0461	636.0356	651.6423	0.0245
0.99	138.7213	151.1018	0.0892	850.7948	953.7817	0.1210	4073.5079	4483.5356	0.1007

ตารางผนวกที่ ค19 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 1.500

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.07705	0.0773	0.0030	0.2826	0.2827	0.0001	1.0000	0.8940	1.549E-05
0.10	0.8467	0.8488	0.0025	3.1591	3.1635	0.0014	9.8186	9.8241	0.0006
0.20	1.8768	1.8857	0.0048	7.0653	7.0870	0.0031	22.0433	22.0710	0.0012
0.30	3.1586	3.1838	0.0080	12.0200	12.0824	0.0052	37.6821	37.7627	0.0021
0.40	4.7995	4.8561	0.0118	18.5124	18.6593	0.0079	58.3984	58.5918	0.0033
0.50	6.9800	7.1010	0.0173	27.3944	27.7121	0.0116	87.1462	87.5749	0.0049
0.60	10.0312	10.2855	0.0254	40.2946	40.9703	0.0168	129.7253	130.6692	0.0073
0.70	14.6415	15.1306	0.0334	60.7781	62.2753	0.0246	199.3032	201.5079	0.0111
0.80	22.5591	23.5331	0.0432	98.5248	102.2772	0.0381	333.6208	339.6757	0.0181
0.90	40.3658	43.0315	0.0660	193.4875	206.4392	0.0669	703.7325	729.2659	0.0363
0.99	143.9505	156.8120	0.0893	898.9499	1056.2023	0.1749	4373.6018	5017.6140	0.1472

ตารางผนวกที่ ค20 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 2.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.0908	0.0908	0.0003	0.3634	0.3635	0.0002	1.1000	1.1001	9.3629E-05
0.10	0.9864	0.9899	0.0035	4.0159	4.0263	0.0026	12.7386	12.7524	0.0011
0.20	2.1831	2.1998	0.0077	8.9685	9.0199	0.0057	28.8970	28.9679	0.0024
0.30	3.6670	3.7134	0.0127	15.2304	15.3776	0.0097	49.3718	49.5783	0.0042
0.40	5.5589	5.6635	0.0188	23.4031	23.7481	0.0147	76.4269	76.9202	0.0064
0.50	8.0609	8.2751	0.0266	34.5270	35.2700	0.0215	113.7400	114.8283	0.0096
0.60	11.5414	11.9650	0.0367	50.5743	52.1441	0.0310	169.0428	171.4330	0.0141
0.70	16.7613	17.6096	0.0506	75.8147	79.2595	0.0454	258.3704	263.9027	0.0214
0.80	25.6383	27.4664	0.0713	121.6683	130.1709	0.0699	431.1300	446.2616	0.0351
0.90	45.3205	50.1874	0.1074	234.2149	262.7408	0.1218	902.2200	965.3735	0.0700
0.99	156.6196	189.0509	0.2071	1021.7163	1344.2582	0.3157	5243.6800	6697.9391	0.2773

ตารางผนวกที่ ค21 ค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาที่การแปลงผันของก๊าซระหว่าง 0.01-0.99 กรณีที่วิเคราะห์จากการคำนวณโดยนิพจน์การแปลงผันของก๊าซ สำหรับอัตราส่วนสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซในโซนอนุภาคเหนือต่อโซนอนุภาคตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 3.000

การแปลงผัน ของก๊าซ; X	อัตราส่วนความยาวของเบดตัวเร่งปฏิกิริยาต่อความยาวถังปฏิกรณ์ ; l_2/L								
	1/3			1/10			1/30		
	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}	k_{real}	k_{est}	Δ_{k^*}
0.01	0.1089	0.1090	0.0005	0.4996	0.4998	0.0004	1.7040	1.7044	0.0002
0.10	1.0000	1.0044	0.0044	5.5111	5.5361	0.0045	18.6883	18.7273	0.0021
0.20	2.6106	2.6400	0.0113	12.2788	12.4023	0.0100	41.8772	42.0728	0.0047
0.30	4.3752	4.4561	0.0185	20.7919	21.1442	0.0169	71.41775	71.9855	0.0080
0.40	6.6147	6.7962	0.0274	31.8330	32.6537	0.0258	110.3382	111.6906	0.0122
0.50	9.5600	9.9301	0.0387	46.7421	48.4962	0.0375	163.9622	166.9397	0.0182
0.60	13.6301	14.3580	0.0534	68.0288	71.6981	0.0539	242.5984	249.0881	0.0268
0.70	19.6836	21.1315	0.07369	101.0439	108.9818	0.0786	369.2018	384.1255	0.0404
0.80	29.8672	32.9596	0.1035	159.8123	178.9851	0.1200	607.6327	647.5068	0.0656
0.90	52.0974	60.2248	0.1560	299.3456	361.2687	0.2069	1232.1466	1390.1630	0.1282
0.99	173.9247	226.8608	0.3044	1206.1112	1848.3540	0.5325	6416.6894	9564.87729	0.4906

ประวัติการศึกษา และการทำงาน

ชื่อ –นามสกุล	นางสาวสตรีรัตน์ เรืองฤทธิ์วงศ์
วัน เดือน ปี ที่เกิด	วันที่ 8 มิถุนายน 2525
สถานที่เกิด	นราธิวาส
ประวัติการศึกษา	วท.บ.(เคมี) มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ (พ.ศ. 2543)
ตำแหน่งหน้าที่การงานปัจจุบัน	นิสิตปริญญาโท
สถานที่ทำงานปัจจุบัน	คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
ผลงานดีเด่นและรางวัลทางวิชาการ	-
ทุนการศึกษาที่ได้รับ	ได้รับทุนจากโครงการพัฒนานักศึกษาด้าน วิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์