วิทยานิพนธ์นี้ใช้แบบจำลองโครงข่ายแบบสตอแคสติกอธิบายค่าการเลือกของปฏิกิริยาแบบต่อเนื่องและค่าความคดเคี้ยวที่เกิดขึ้นภายในคะตะลิสต์ โดยพิจารณาถึงอิทธิพลของ Thiele modulus และโครงสร้างของรูพรุนที่มีรูปแบบการกระจายขนาดต่างๆ เช่น Bimodal, Uniform และ Weibull เปรียบเทียบกับโครงข่ายแบบ Single size ภายใต้พื้นที่ผิวเท่ากัน ผลการศึกษาพบว่าโครงข่ายที่มีการกระจายขนาดของรูพรุนแบบ Bimodal ให้ค่าความคดเคี้ยวสูงที่สุด ขณะที่โครงข่ายที่มีการกระจายขนาดของรูพรุนแบบ Weibull ให้ค่าความคดเคี้ยวใกล้เคียงกับหนึ่ง ความแตกต่างของพฤติกรรมการแพร่ที่เกิดขึ้นพร้อมกับปฏิกิริยาภายในโครงข่ายต่างๆแสดงให้เห็นอย่างชัดเจนด้วยแผนภูมิความน่าจะเป็นของการกระจายอัตราการเกิดปฏิกิริยาและทัศนะการกระจายภายในโครงข่าย ในช่วงที่ Thiele modulus ของสารตั้งต้นมีค่าต่ำ ค่าการเลือกสำหรับโครงข่ายแบบ Single size จะมีค่าสูงที่สุด ขณะที่โครงข่ายที่มีการกระจายขนาดของรูพรุนแบบ Bimodal จะมีค่าต่ำที่สุด แต่ในช่วงที่ Thiele modulus ของสารตั้งต้นสูงขึ้น ผลของค่าการเลือกจะเป็นไปในทิศทางตรงข้าม ซึ่งลักษณะดังกล่าวเป็นผลเนื่องจากการบดบังของรูพรุนขนาดเล็กต่อรูพรุนขนาดใหญ่เป็นหลัก นอกจากนี้เมื่อพิจารณาการเชื่อมต่อของรูพรุนต่างๆ พบว่าการเชื่อมต่อของรูพรุนที่มีค่าสูงจะให้ค่าความคดเคี้ยวต่ำกว่าการเชื่อมต่อของรูพรุนที่มีค่าต่ำ ในช่วง Thiele modulus ของผลิตภัณฑ์มีค่าต่ำ ค่าการเลือกสำหรับโครงข่ายที่มีการเชื่อมต่อของรูพรุนสูงจะสูงกว่าโครงข่ายที่มีการเชื่อมต่อของรูพรุนต่ำ แต่ในช่วง Thiele modulus ของผลิตภัณฑ์มีค่าสูง ผลของค่าการเลือกจะผกผันกับในช่วงแรก

This thesis was aimed to study selectivity for consecutive reaction and tortuosity that occur in a stochastic pore network. Influence of reaction speed and pore structures that are characterised by bimodal, uniform and weibull size distributions was investigated. The single-sized network as an ideallized pore structure was used as a baseline to compare the performance in terms of tortuosity and selectivity with the other pore structures. The results showed that the bimodal size distribution exhibits highest tortuosity, while the weibull size distribution shows the lowest one, which is close to unity. Diffusion and reaction patterns occurring in the structural pore networks can be elucided through the environmental distribution and 2-D visualization. In case of low thiele modulus of reactant, the single-sized network exhibits the highest selectivity, while the bimodal size distribution exhibits the lowest selectivity. However, when thiele modulus of reactant is high, it appears that the selectivity for bimodal size distribution becomes the highest value whereas the selectivity for the single-sized network shows the lowest one. All these are due to shielding of large pores by small pores. Besides, when pore connectivity is considered, it seems that high pore connectivity gives lower tortuosity than low pore connectivity. In case of low thiele modulus of product, high pore connectivity gives selectivity higher than low pore connectivity. However, when thiele modulus of product is high, it appears that results of selectivities are opposite.