

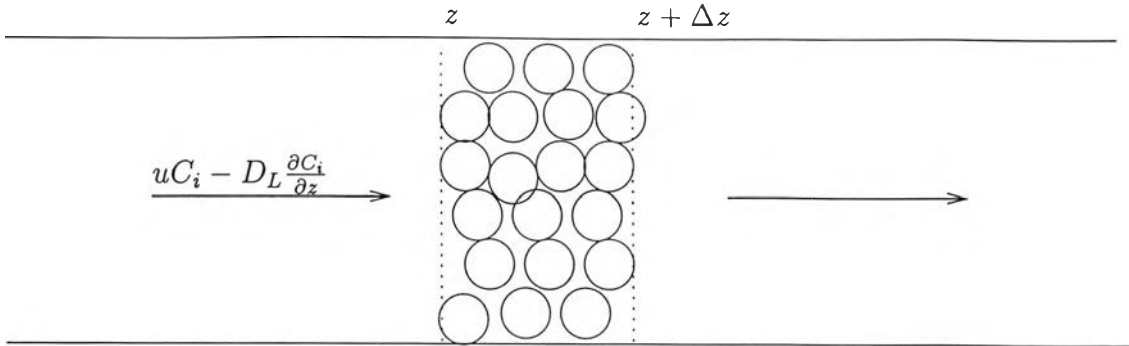
## บทที่ 4

# การจำลองระบบเบดเคลื่อนที่จำลอง

### 4.1 แบบจำลองคณิตศาสตร์ของระบบ

พฤติกรรมการแยกแก๊สผสมภายในหอดูดซับที่ดำเนินการแบบเบดเคลื่อนที่จำลอง สามารถเขียนเป็นสมการคณิตศาสตร์ด้วยสมการอนุรักษ์มวลสาร พลังงาน และโมเมนตัม ภายใต้สมมุติฐานต่อไปนี้

- อุณหภูมิภายในหอดูดซับไม่เปลี่ยนแปลง เมื่อเกิดการดูดซับ
- วัฏภาคแก๊สในหอดูดซับเป็นแบบแก๊สอุดมคติ (Ideal gas)
- ความดันลดของแต่ละโซนภายในหอดูดซับมีค่าน้อยมากจึงไม่จำเป็นต้องพิจารณา และทำให้ความเร็วในการไหลไม่เปลี่ยนแปลงตามตำแหน่งในแนวแกน
- รูปแบบการไหลของวัฏภาคแก๊สเป็นแบบกระจายตามแนวแกน (Disperse plug flow)
- อัตราการดูดซับภายในหอดูดซับเร็วมากพอ ทำให้เกิดสมดุลเฉพาะจุด (Local equilibrium) ทุกจุดในหอดูดซับ
- สมดุลการดูดซับเป็นแบบแลงเมียร์ชนิดหลายองค์ประกอบ (Nonstoichiometry constant selectively langmuir isotherm)
- ตัวดูดซับจัดเรียงอย่างสม่ำเสมอตลอดทั้งเบด จึงทำให้ความพรุนสม่ำเสมอตลอดทั้งเบดเช่นเดียวกัน
- ตัวดูดซับเป็นชนิดไม่มีรูพรุน การดูดซับเกิดขึ้นที่พื้นผิวภายนอกเท่านั้น



รูปที่ 4.1: รูปแสดงภาคตัดขวางของหอดูดซับ

จากรูปที่ 4.1 และสมมุติฐานข้างต้นสามารถเขียนสมการอนุรักษ์มวลสารของแต่ละองค์ประกอบได้ดังนี้

$$\frac{\partial y_i}{\partial \tau} + \beta_i \left( \frac{\partial \theta_i}{\partial \tau} \right) + \frac{\partial y_i}{\partial z} - \frac{1}{Pe} \left( \frac{d_p}{L} \right) \left( \frac{\partial^2 y_i}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, NC) \quad (4.1)$$

และสมการดุลการดูดซับแบบแลงเมียร์ชนิดหลายองค์ประกอบคือ

$$\theta_i = \frac{K_i y_i}{1 + \sum_{l=1}^{NC} K_l y_l} \quad (i = 1, 2, \dots, NC) \quad (4.2)$$

โดยมีสภาวะเริ่มต้นคือ

$$y_i(z, 0) = 0 \quad (4.3)$$

และมีสภาวะขอบเขตที่ปลายทั้งสองของแต่ละโซนเป็นดังนี้

$$y_i(0, \tau) = y_i^j - \frac{\partial y_i}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (i = 1, 2, \dots, NC \quad j = 1, 2, 3, 4) \quad (4.4)$$

และ

$$\frac{\partial y_i(z, \tau)}{\partial z} \Big|_{z \rightarrow \infty} = 0 \quad (j = 1, 2, 3, 4) \quad (4.5)$$

ในการจำลองเชิงตัวเลข สภาวะขอบเขตแรกสามารถทำให้ง่ายขึ้นได้เป็น

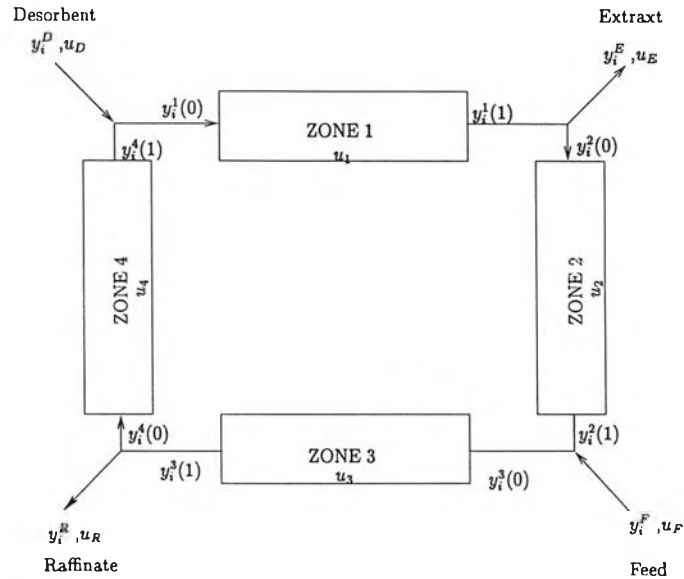
$$y_i(0, \tau) \cong y_i^j \quad (4.6)$$

และตัวแปรไร้มิติ  $Pe$  ซึ่งปรากฏในสมการอนุรักษ์มวลสารของแต่ละองค์ประกอบซึ่งบอกถึงอิทธิพลของการแพร่ในแนวแกนต่ออิทธิพลของการพาในทิศทางแก๊สคำนวณได้ตามสมการของ Butt (Butt,

1980)

$$\frac{\varepsilon}{Pe} = \frac{0.3}{ReSc} + \frac{0.5}{1 + \frac{3.8}{ReSc}} \quad (4.7)$$

เนื่องจากว่าทั้ง 4 โซนของหอดูดซับจะถูกนำมาต่อกันเป็นวงดังรูป 4.2 ดังนั้นจะได้สมการดุลมวลสาร ณ จุดที่มีการดึงสารออกหรือป้อนสารเข้าดังนี้



รูปที่ 4.2: แสดงลักษณะการเชื่อมต่อการไหลของของไหลในโซนต่างๆของระบบ SMB แบบ 4 โซน

- Desorbent

$$y_i^D u_D + y_i^4(1) u_4 = y_i^1(0) u_1 \quad (4.8)$$

- Extract

$$y_i^E u_E + y_i^2(0) u_2 = y_i^1(1) u_1 \quad (4.9)$$

- Feed

$$y_i^F u_F + y_i^2(1) u_2 = y_i^3(0) u_3 \quad (4.10)$$

- Raffinate

$$y_i^R u_R + y_i^4(0) u_4 = y_i^3(1) u_3 \quad (4.11)$$

## 4.2 การหาคำตอบของแบบจำลองคณิตศาสตร์

สมการแบบจำลองการดูดซับที่ได้ จะประกอบด้วยชุดของสมการอนุพันธ์แต่ละองค์ประกอบภายในหลอดดูดซับ ซึ่งเป็นสมการอนุพันธ์ย่อยอันดับสองแบบพาราโบลิกแบบไม่เชิงเส้น และสมการสมดุลการดูดซับซึ่งเป็นสมการพีชคณิตแบบไม่เชิงเส้น ซึ่งชุดของสมการดังกล่าวไม่สามารถหาคำตอบในเชิงวิเคราะห์ได้ จะต้องอาศัยวิธีการเชิงตัวเลขในการหาคำตอบ ซึ่งวิธีหนึ่งที่นิยมใช้ก็คือวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite difference method) ซึ่งเป็นการประมาณค่าอนุพันธ์ด้วยค่าผลต่างของตำแหน่งข้างเคียง โดยจะเปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์เป็นสมการพีชคณิต ซึ่งหาคำตอบได้ง่ายขึ้น วิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์นี้สามารถแบ่งได้เป็น 2 วิธี คือ

1. วิธีเอ็กซ์พลิซิท (Explicit method) วิธีนี้จะคำนวณคำตอบโดยประมาณได้จากเงื่อนไขเริ่มต้นและเงื่อนไขขอบเขต วิธีนี้มีข้อดีคือ การแก้สมการทำได้ง่าย แต่มีข้อเสียคือ ความถูกต้องของคำตอบที่ได้จะขึ้นอยู่กับความละเอียดของการแบ่งช่วงตัวแปรต้นของสมการอนุพันธ์ ซึ่งตามสมการที่ 4.1 ก็คือ  $\Delta\tau$  และ  $\Delta z$  ถ้าหากค่า  $\Delta z$  มีค่าน้อยก็จะได้คำตอบที่มีความถูกต้องมากขึ้น แต่ระบบอาจเกิดความไม่เสถียร (Instability) ได้ ถ้าหากว่า  $\frac{\Delta\tau}{\Delta z^2} > \frac{0.5}{Pe} \left(\frac{d_p}{L}\right)$  (Nakamura, 1993) จากเงื่อนไขของความเสถียรข้างต้นจะเห็นว่าการลดขนาดของ  $\Delta z$  ลงครึ่งหนึ่งเพื่อให้คำตอบมีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น จำเป็นต้องลดขนาดของ  $\Delta\tau$  ลงตามเหลือหนึ่งในสี่ ดังนั้นความละเอียดของการแบ่งช่วงตัวแปรรวมทั้งระบบจะเพิ่มเป็น  $2 \times 4 = 8$  เท่า ซึ่งทำให้มีตำแหน่งที่ต้องประมาณคำตอบเพิ่มเป็น 8 เท่าด้วย
2. วิธีอิมพลิซิท (Implicit method) วิธีนี้ความละเอียดของการแบ่งช่วงตัวแปรต้นจะเป็นอิสระต่อกันทำให้ไม่จำเป็นต้องใช้ความละเอียดของการแบ่งช่วงตัวแปรมากเท่ากับวิธีแรก แต่การหาคำตอบต้องสุ่มเดาคำตอบเริ่มต้นก่อนและการสุ่มเดามักมีผลต่อคำตอบสุดท้าย ทำให้กรณีที่ระบบสมการไม่เป็นเส้นตรงวิธีนี้ไม่สามารถยืนยันถึงการสามารถหาคำตอบได้

เวลาที่ต้องใช้ในการหาคำนวณของทั้งสองวิธีนี้จะขึ้นอยู่กับรูปแบบของสมการพีชคณิตที่ได้ และความถี่ของการแบ่งช่วงตัวแปรต้นที่เลือกใช้ สำหรับในงานวิจัยนี้เลือกใช้วิธีแบบเอ็กซ์พลิต เนื่องจากระบบสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยเริ่มต้นนั้นเป็นสมการไม่เป็นเชิงเส้น ดังนั้นการใช้วิธีแบบเอ็กซ์พลิตจะเหมาะสมมากกว่า เมื่อใช้วิธีการแบบเอ็กซ์พลิต สมการที่ 4.1 จะเปลี่ยนรูปเป็น

$$\frac{y_{i,z}^{T+1} - y_{i,z}^T}{\Delta\tau} + \beta_i \left( \frac{\theta_{i,z}^{T+1} - \theta_{i,z}^T}{\Delta\tau} \right) + \frac{y_{i,z+1}^T - y_{i,z}^T}{\Delta z} + E_{Lj} \left( \frac{y_{i,z+1}^T - 2y_{i,z}^T + y_{i,z-1}^T}{\Delta z^2} \right) = 0 \quad (4.12)$$

โดยที่  $E_{Lj} = \frac{1}{P_e} \left( \frac{d_p}{L} \right)$  และเมื่อจัดรูปใหม่จะได้

$$y_{i,z}^{T+1} = y_{i,z}^T + (\theta_{i,z}^{T+1} - \theta_{i,z}^T) + \frac{\Delta\tau}{\Delta z} \left( y_{i,z+1}^T - y_{i,z}^T + \frac{E_{Lj}}{\Delta z} (y_{i,z+1}^T - 2y_{i,z}^T + y_{i,z-1}^T) \right) \quad (4.13)$$

สมการ 4.13 ตัวแปรทางซ้ายมือจะทราบค่าได้ก่อนจากสถานะขอบเขตและสถานะเริ่มต้น ยกเว้นตัว  $\theta_{i,z}^{T+1}$  ซึ่งจะหาค่าได้จากสมการสมดุลการดูดซับสมการที่ 4.2 แต่เนื่องจากสมการสมดุลการดูดซับที่ใช้เป็นสมการแลงเมียร์แบบหลายองค์ประกอบซึ่งการหาค่า  $\theta_{i,z}^{T+1}$  ได้จะต้องทราบค่า  $y_{i,z}^{T+1}$  ของทุกองค์ประกอบก่อน ดังนั้นการหาค่า  $y_{i,z}^{T+1}$  จะต้องสุ่มเดา  $y_{i,z}^{T+1}$  ก่อนแล้วจึงทำการคำนวณจนกระทั่งได้คำตอบ ส่วนความถูกต้องของคำตอบที่ได้จะขึ้นอยู่กับความละเอียดของการแบ่งตัวแปรที่เหมาะสม ซึ่งความน่าเชื่อถือของวิธีการแก้สมการแบบนี้ จะพิสูจน์ในการทดสอบขั้นถัดไป

### 4.3 การทดสอบแบบจำลองกับการทดลองจริง

#### 4.3.1 การเลือกพารามิเตอร์เชิงตัวเลขที่เหมาะสม

ในการหาคำตอบของแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยใช้วิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์ ทำให้เกิดพารามิเตอร์เชิงตัวเลขเพิ่มขึ้นมาสองกลุ่มคือ ความคลาดเคลื่อนต่ำสุดที่ใช้ในการหยุดคำนวณ และความละเอียดในการแบ่งช่วงตัวแปรต้น จำนวนของการแบ่งช่วงตัวแปร  $x$  ที่ใช้คือ  $NX$  จุด และจำนวนของการแบ่งช่วงตัวแปร  $t$  ที่ใช้คือ  $NT$  จุด ความคลาดเคลื่อนต่ำสุดที่ใช้ในการหยุดคำนวณในกรณีต่างๆกำหนดไว้ดังนี้

- การหยุดคำนวณเมื่อระบบเข้าสู่สภาวะคงตัว

$$\left( \sum_{i=1}^{NC} \sum_{k=1}^{NX} |y_i(k, c) - y_i(k, c-1)| \right)^j \leq 0.0005 \quad j = 1, 2, 3, 4$$

เมื่อ  $c$  คือเวลาท้ายสุดของคาบปัจจุบัน และ  $c-1$  คือเวลาท้ายสุดของคาบก่อนหน้านี้นี้หนึ่งคาบ

- การหยุดคำนวณเมื่อการสุ่มเตลู่เข้าสู่คำตอบ

– กรณี  $y_i \leq 0.0005$

$$\frac{(y_i)_m - (y_i)_{m-1}}{0.0005} \leq 0.0005$$

เมื่อ  $m$  คือการสุ่มเตลู่ ณ ครั้งปัจจุบัน และ  $m-1$  คือการสุ่มเตลู่ ณ ครั้งก่อนหน้านี้นี้หนึ่งครั้ง

– กรณี  $y_i > 0.0005$

$$\frac{(y_i)_m - (y_i)_{m-1}}{(y_i)_m} \leq 0.0005$$

ส่วนความละเอียดในการแบ่งช่วงตัวแปรต้นจะทำการทดสอบโดยการเขียนวิธีการหาคำตอบ ไว้เป็นฟังก์ชันในโปรแกรม MATLAB แล้วเลือกเฉพาะโซนที่ 3 ของระบบเบดเคลื่อนที่จำลอง มาทำการทดสอบโดยการป้อนทั้งของผสมที่ต้องการแยกพร้อมทั้งตัวคายการดูดซับเข้าไปตามระยะเวลาที่กำหนดเสร็จแล้วจึงทำการเช็คความถูกต้องของสมการดุลมวลสารของแต่ละองค์ประกอบ และรูปร่างของโปรไฟล์ความเข้มข้นที่ได้ เมื่อใช้ NX และ NT ที่ต่างกัน ซึ่งพารามิเตอร์ต่างๆที่ใช้ในการคำนวณแสดงไว้ในตารางที่ 4.1

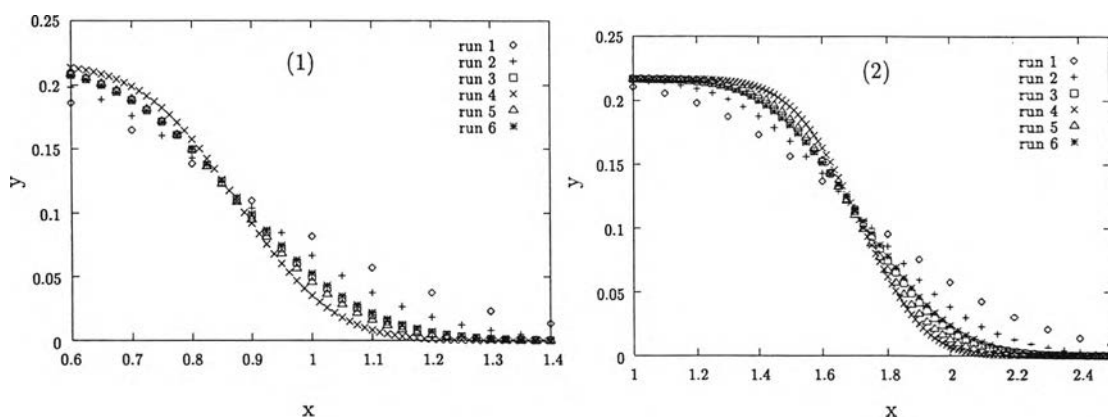
ตารางที่ 4.1: แสดงพารามิเตอร์ที่ใช้ทดสอบวิธีการแก้สมการด้วยวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์แบบเอ็กพลิตในระบบที่ใช้ตัวดูดซับเป็นซิลิกาเจลและตัวคายการดูดซับเป็นมีเทน

พารามิเตอร์	ค่าที่ใช้ทดสอบ
$L_3$	300 เซนติเมตร
$n_3$	3
$t_p$	10 นาที
$m_3$	14.336
$m_F$	6.216
$y_{AF}$	0.5
$y_{BF}$	0.5
$C_t$	0.0402 mmole/cm <sup>3</sup>

และผลทดสอบที่ได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.3 และตารางที่ 4.2 ความละเอียดในการแบ่งช่วงตัวแปรที่

ตารางที่ 4.2: แสดงผลการทดสอบวิธีการแก้สมการด้วยวิธีไฟไนต์ดิฟเฟอเรนซ์แบบเอ็กพลิต

การทดลองครั้งที่	NX	NT	ความคลาดเคลื่อน		เวลาที่ใช้ในการคำนวณ นาที
			A	B	
1	10	300	-11.3179	-5.3445	0.3113
2	20	300	-5.5857	-2.4515	0.4788
3	40	300	-2.7187	-1.0004	0.7653
4	80	300	-1.2854	-0.2767	1.3842
5	40	150	-2.0529	-0.3373	0.3408
6	40	600	-3.0508	-1.3316	1.564



รูปที่ 4.3: ลักษณะการกระจายความเข้มข้นที่ได้จากการจำลองเมื่อใช้ค่า NX และ NT ต่างๆกัน โดยใช้พารามิเตอร์ต่างๆในการจำลองตามตารางที่ 4.1 และตารางที่ 4.2 (1) ลักษณะการกระจายความเข้มข้นของอีเทน (2) ลักษณะการกระจายความเข้มข้นของเอทิลีน

เหมาะสมจะต้องพิจารณาจากความคลาดเคลื่อนของสมดุลมวลสารและเวลาที่ใช้ในการคำนวณในตารางที่ 4.2 และรูปร่างของลักษณะการกระจายความเข้มข้นในรูปที่ 4.3 ซึ่งในกรณีนี้คือที่  $NX = 80$  และ  $NT = 300$  ซึ่งให้ค่าความคลาดเคลื่อนของสมดุลมวลสารที่ต่ำมากพอโดยใช้เวลาในการคำนวณไม่สูงมากนัก

#### 4.3.2 การทดสอบแบบจำลองกับผลการทดลองจริง

การทดสอบความน่าเชื่อถือของผลที่ได้จากแบบจำลองที่เลือกใช้ทำได้โดยการเปรียบเทียบกับผลการทดลองจริงแต่เนื่องจากว่าไม่มีผลการทดลองจริงของของผสมอีเทน-เอทิลีน ดังนั้นจึงเลือกของผสมชนิดอื่นที่มีผลการทดลองจริงมาทดสอบ ซึ่งใน ที่นี้เราเลือกผลการทดลองของ Ching

(Ching, 1987) ซึ่งทดลองแยกของผสม กลูโคส-ฟรุคโตส ในสองการทดลองที่ใช้ตัวดูดซับที่ต่างกัน มาทดสอบความน่าเชื่อถือของแบบจำลองที่ใช้ ซึ่งพารามิเตอร์ต่างๆที่ใช้ในการทดสอบแสดงไว้ในตารางที่ 4.3 ถึง 4.5

ตารางที่ 4.3: แสดงอัตราการไหลที่ใช้ในโซนต่างๆ

การทดลองที่	$Q_1^{TMB}$ (มิลลิลิตร/นาที่)	$Q_2^{TMB}$ (มิลลิลิตร/นาที่)	$Q_3^{TMB}$ (มิลลิลิตร/นาที่)	$Q_4^{TMB}$ (มิลลิลิตร/นาที่)
1	47.38	29.16	39.16	24.12
4	74.71	57.27	62.27	47.32

ตารางที่ 4.4: แสดงค่าอัตราการไหลของของแข็ง ความเข้มข้นในสายป้อนและจำนวนการแบ่งช่วงตัวแปร  $t$  และ  $x$  ที่เหมาะสม

การทดลองที่	$S$ (มิลลิลิตร/นาที่)	$t_p$ นาที่	$C_F$ (กรัม/100 มิลลิลิตร)	NX	NT
1	69	21.5	25/25	20	300
1	126.5	11.25	25/25	60	600

สมการดูดซับของกลูโคสและฟรุคโตสที่ได้จะเป็นไปตามสมการ

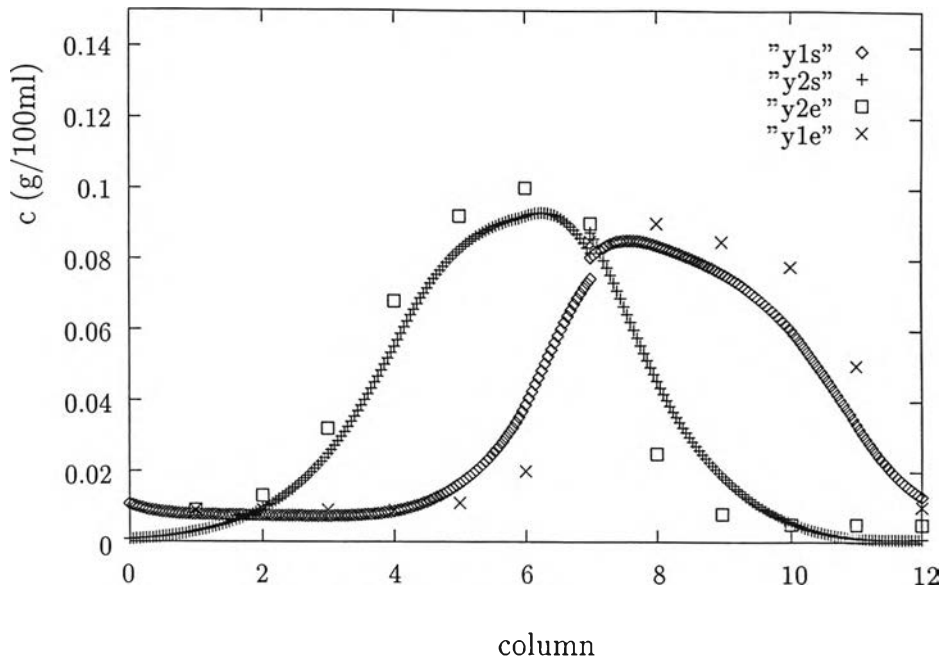
$$q = A_1 + c_1A_2 + c_2A_3$$

ตารางที่ 4.5: แสดงค่าพารามิเตอร์ A1 ถึง A3

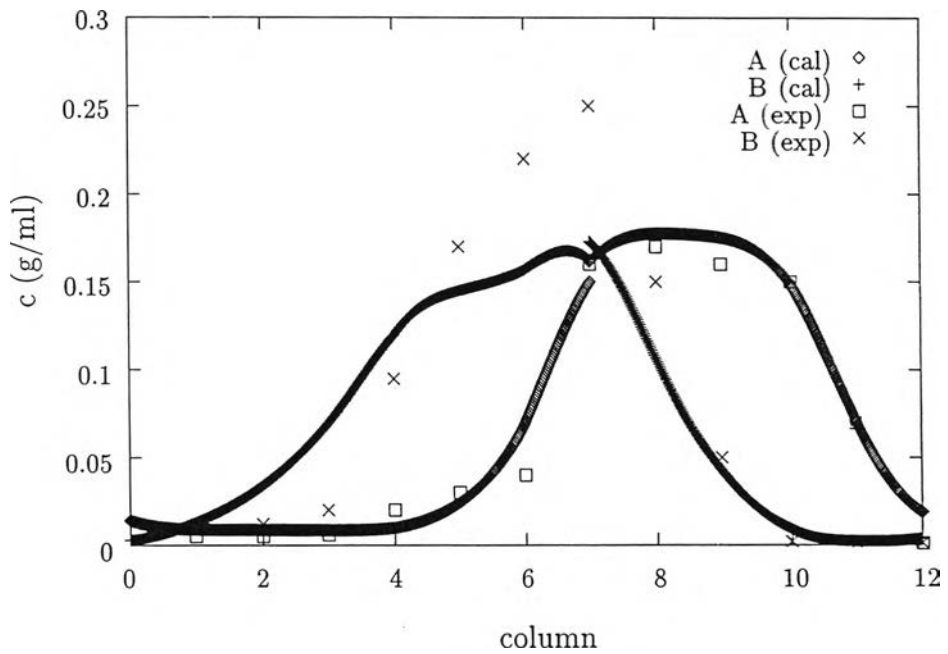
การทดลองที่	ฟรุคโตส			กลูโคส		
	A1	A2	A3	A1	A2	A3
1	0.675	-0.4	-0.05	0.36	0	0
4	0.465	0.25	0.15	0.36	0.15	0.1

และผลการทดลองที่ได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.4 และรูปที่ 4.5 ซึ่งจากผลการทดสอบพบว่าผลที่ได้จากแบบจำลองสอดคล้องกันกับผลการทดลองจริง ซึ่งยืนยันถึงความน่าเชื่อถือของแบบจำลองที่ใช้





รูปที่ 4.4: ลักษณะการกระจายความเข้มข้นของของผสม ฟรุคโตส-กลูโคส ที่ได้จากแบบจำลองที่ศึกษาเทียบกับผลการทดลองจริงจากการทดลองที่ 1



รูปที่ 4.5: ลักษณะการกระจายความเข้มข้นของของผสม ฟรุคโตส-กลูโคส ที่ได้จากแบบจำลองที่ศึกษาเทียบกับผลการทดลองจริงจากการทดลองที่ 4

#### 4.4 แนวทางการศึกษา

ของผสมที่เลือกนำมาทำการแยกเป็นของผสมอีเทน-เอทิลีนซึ่งมีสัดส่วนขององค์ประกอบอย่างละ 0.5 โดยโมล ในการออกแบบหอดูดซับจะใช้แนวทางที่คิดสำหรับกรณีที่เกิดการแยกโดยสมบูรณ์มาใช้ ซึ่งพารามิเตอร์ต่างๆที่ใช้ในการทดลองจะประกอบด้วย

- ขนาดของหอดูดซับ

หอดูดซับที่ใช้เป็นทรงกระบอกดังนั้นพารามิเตอร์ที่กำหนดขนาดหอดูดซับก็คือความยาวและเส้นผ่าศูนย์กลาง ในแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่เลือกใช้ไม่ได้พิจารณาอิทธิพลของเส้นผ่าศูนย์กลางของหอดูดซับ ดังนั้นขนาดเส้นผ่าศูนย์กลางหอดูดซับจึงเป็นพารามิเตอร์อิสระที่ไม่กำหนดค่าไว้ ส่วนความยาวของหอดูดซับเนื่องจากยังไม่มีวิธีการประมาณค่าความยาวที่เหมาะสมดังนั้นในตอนต้นจึงเลือกความยาวของแต่ละโซนของหอดูดซับมีค่าเท่ากับ 1 เมตร

- ตัวดูดซับ

ตัวดูดซับที่ใช้มี 2 ชนิดคือ ซิลิกาเจล (Oliver ,1997 ) กับ ถ่านกัมมันต์ (Valenzuels ,1989 ) ซึ่งแบ่งออกได้เป็น 2 ประเภท คือ

- ซิลิกาเจล เป็นตัวดูดซับที่มีขั้ว ดังนั้นจะดูดซับเอทิลีนได้มากกว่าอีเทน และค่าคงที่สมดุลของแลงเมียร์ ของสารแต่ละตัวจะมีค่าไม่สูงมาก
- ถ่านกัมมันต์ เป็นตัวดูดซับที่ไม่มีขั้ว ซึ่งจะดูดซับอีเทนได้ดีกว่าเอทิลีน และค่าคงที่สมดุลของแลงเมียร์ ของสารแต่ละตัวจะมีค่าค่อนข้างสูง

จากตัวดูดซับทั้ง 2 ชนิดที่เลือกมาศึกษาจะทำให้ทราบถึงอิทธิพลของค่าคงที่สมดุลของการดูดซับของแลงเมียร์ ต่อสมรรถนะของระบบ ที่ต้องการแยก อันได้แก่ ความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์ที่ได้ และความเจือจางที่เกิดขึ้น (Dilution effect) ในผลิตภัณฑ์แต่ละสาย

- ตัวคายการดูดซับ

ตัวคายการดูดซับที่ใช้จะปนอยู่ในผลิตภัณฑ์ที่ได้จากหอดูดซับ ซึ่งจะต้องทำการแยกออกจาก

ตารางที่ 4.6: ระบบตัวดูดซับ-ตัวถูกดูดซับที่ใช้ศึกษา

ตัวดูดซับ	ตัวคายการดูดซับ	จุดเดือด (K)	อุณหภูมิที่ศึกษา (K)
ซิลิกาเจล	มีเทน	111.66	303
	โพรเพน	231.08	303
ถ่านกัมมันต์	ไนโตรเจน	77.35	301
	คาร์บอนไดออกไซด์	194.67	301

ผลิตภัณฑ์ที่ต้องการอีกครั้งหนึ่ง ดังนั้นแนวทางการ เลือกตัวคายการดูดซับในขั้นต้น จะต้องเป็นตัวที่สามารถแยกออกจากผลิตภัณฑ์ได้ง่ายในขั้นตอนถัดไป ซึ่งมักเป็นวิธีการกลั่นแยก ดังนั้นค่าการระเหยสัมพัทธ์ ของตัวคายการดูดซับจะต้องต่างจากผลิตภัณฑ์มากๆ ตัวคายการดูดซับที่เลือกใช้ในงานวิจัยนี้ได้แก่ มีเทน, โพรเพน, ไนโตรเจน และ คาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งเมื่อพิจารณาถึงสมบัติการระเหยจะแบ่งได้ออกเป็น 2 กลุ่ม คือ

- กลุ่มที่ระเหยได้ง่ายกว่าของผลมอีเทน-เอทิลีน ได้แก่ ไนโตรเจน, และ มีเทน
- กลุ่มที่ระเหยได้ยากกว่าของผลมอีเทน-เอทิลีน ได้แก่ โพรเพน และ คาร์บอนไดออกไซด์

แต่ถ้าพิจารณาถึงสมดุลการดูดซับก็จะสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 กลุ่มเช่นเดียวกัน คือ

- กลุ่มที่มีค่า K ต่ำกว่าของผลมอีเทน-เอทิลีน ได้แก่ มีเทน และ คาร์บอนไดออกไซด์
- กลุ่มที่มีค่า K สูงกว่าของผลมอีเทน-เอทิลีน ได้แก่ โพรเพน และ ไนโตรเจน

ซึ่งรายละเอียดของระบบตัวดูดซับ-ตัวคายดูดซับที่ใช้ศึกษา จุดเดือด และ อุณหภูมิที่ศึกษา แสดงไว้ในตารางที่ 4.6 และค่าพารามิเตอร์ของสมดุลแบบแลงเมียร์ของสารแต่ละชนิดที่ศึกษา แสดงไว้ในตารางที่ 4.7

- การเลือกความดันที่ใช้ในการทดลอง

ความดันของระบบจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับความเข้มข้นของแก๊สตามกฎของแก๊สอุดมคติ ซึ่งสมการสมดุลของแลงเมียร์แบบหลายองค์ประกอบ ปริมาณของสารที่ถูกดูดซับจะขึ้นอยู่กับความเข้มข้นรวมของระบบด้วย ดังนั้นเมื่อความเข้มข้นรวมของระบบเปลี่ยน สมดุลของการดูดซับก็

ตารางที่ 4.7: แสดงค่าพารามิเตอร์ของสมดุลแบบแลงเมียร์ของระบบที่ศึกษา

ตัวดูดซับ	ตัวถูกดูดซับ	$q_s$	K
ซีลิกาเจล	มีเทน	0.554	3.908
	โพรเพน	4.552	8.428
	อีเทน	2.516	4.486
	เอทิลีน	5.771	4.003
ถ่านกัมมันต์	ไนโตรเจน	0.418	55.347
	คาร์บอนไดออกไซด์	7.396	6.166
	อีเทน	4.713	55.25
	เอทิลีน	4.617	35.988

เปลี่ยนไปด้วย ความดันของระบบที่เหมาะสมจะต้องให้ค่าอัตราการไหลของสารป้อนที่สูง ให้ค่าอัตราการไหลของ ตัวคายการดูดซับที่ต่ำ และให้ระบบมีความเสถียรสูง ซึ่งการเลือกความดันที่เหมาะสมจะได้จากการคำนวณค่า  $m_j$  เทียบกับความดันที่เลือกใช้

- การหาค่า  $m_j$  ที่เหมาะสมในแต่ละโซนซึ่งทำให้เกิดการแยกโดยสมบูรณ์

เนื่องจากว่า สมดุลที่เราเลือกใช้เป็นสมดุลแบบหลายองค์ประกอบของแลงเมียร์ ซึ่งไม่สามารถหาคำตอบเชิงวิเคราะห์ของแต่ละโซนได้ (Mazzotti, 1996) จะต้องอาศัยการแก้สมการในหัวข้อ ?? เพื่อหาค่าอัตราการไหลที่เหมาะสม

- จำนวนคอลัมน์ที่ต้องใช้ในแต่ละโซน และความยาวในแต่ละโซน เนื่องจากในงานวิจัยก่อนหน้านี้ยังไม่มีการอธิบายถึงความสัมพันธ์ระหว่างความยาวและจำนวนคอลัมน์ในแต่ละโซน กับสมรรถนะของระบบ SMB ดังนั้นในงานวิจัยการศึกษาถึงความสัมพันธ์ระหว่างความยาวและจำนวนคอลัมน์ในแต่ละโซน กับสมรรถนะของระบบ SMB จึงกำหนดขอบเขตของความยาวและจำนวนคอลัมน์ที่จะศึกษาดังนี้

- กำหนดความยาวมากที่สุดของแต่ละโซนคือ 4 เมตร โดยในตอนเริ่มต้นจะใช้ความยาวเท่ากับ 1 เมตร
- แบ่งแต่ละโซนออกเป็นเบตย่อย ไม่เกิน 6 เบตต่อโซน

- ความเร็วของของไหลในแต่ละโซน และคาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกจากระบบ หลังจากที่เราทราบค่า  $m_j$  แล้ว เมื่อกำหนดค่าความเร็วของตัวดูดซับในหอดูดซับซึ่งมีค่าเท่ากันในทุกโซน จะสามารถคำนวณหาความเร็วของของไหลในแต่ละโซนได้ทันที เนื่องจากระบบ SMB ตัวดูดซับไม่ได้เคลื่อนที่จริง ดังนั้นความเร็วเทียบเท่าของตัวดูดซับจะหาได้จากอัตราส่วนของระยะทางที่เลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกหนึ่งครั้งซึ่งเท่ากับความยาวของหนึ่งโซนย่อยต่อคาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออก ความยาวของหนึ่งโซนย่อยทราบได้จากหัวข้อก่อนหน้านี้ ดังนั้นจึงเหลือเพียงคาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกที่ต้องกำหนดค่า ซึ่งในการใช้งานจริงจะอยู่ในช่วงประมาณ 10-30 นาที ในงานวิจัยนี้จะกำหนดค่าคาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกไว้ที่ 10 นาที

## 4.5 ขอบเขตของการศึกษา

เมื่อหาค่าพารามิเตอร์ต่างๆตามหัวข้อ 4.4 ครบแล้วจะทำการศึกษาระบบ ดังนี้

1. เริ่มจากระบบที่ใช้ตัวดูดซับเป็นซิลิกาเจล และตัวคายการดูดซับเป็นมีเทน ใช้ความยาวในแต่ละโซนเท่ากับ 1 เมตร ใช้หนึ่งคอลัมน์ย่อยต่อโซน ใช้คาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกเป็น 10 นาที และใช้ค่า  $m_j$  ที่คำนวณได้สำหรับระบบ TMB สำหรับเริ่มการจำลอง เมื่อได้ลักษณะการกระจายความเข้มข้นของหอดูดซับทั้ง 4 โซน ที่สภาวะคงตัวแล้วจึงคำนวณความเข้มข้นและความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์ในแต่ละสาย ในกรณีที่ค่า  $m_j$  เริ่มต้นไม่สามารถทำให้เกิดการแยกได้จะต้องปรับค่า  $m_j$  ตามข้อ 2 แต่ถ้าหากค่า  $m_j$  เริ่มต้นทำให้เกิดการแยกได้ จะข้ามไปทำการศึกษาในข้อที่ 3
2. แยกพิจารณาความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์ในแต่ละสายดังนี้
  - 2.1. ถ้าหากผลิตภัณฑ์เอ็กซ์แทรกไม่บริสุทธิ์จะปรับค่า  $m_j$  ดังนี้
    - เพิ่มค่า  $m_2$  ถ้าหากว่าลักษณะการกระจายความเข้มข้นของโซนที่ 1 ณ เวลาท้ายคาบของการเลื่อนตำแหน่งดีงสารเข้าออกจากระบบไม่มีผลิตภัณฑ์ราฟพิเนทเหลืออยู่

- ลดค่า  $m_4$  ถ้าหากว่าลักษณะการกระจายความเข้มข้นของโซนที่ 1 ณ เวลาท้ายคาบของการเลื่อนตำแหน่งตั้งสารเข้าออกจากระบบมีผลิตภัณฑ์กราฟฟิเนทเหลืออยู่

2.2. ถ้าหากผลิตภัณฑ์กราฟฟิเนทไม่บริสุทธิ์จะปรับค่า  $m_j$  ดังนี้

- ลดค่า  $m_3$  ถ้าหากว่าลักษณะการกระจายความเข้มข้นของโซนที่ 4 ณ เวลาท้ายคาบของการเลื่อนตำแหน่งตั้งสารเข้าออกจากระบบไม่มีผลิตภัณฑ์เอ็กซ์แทรกเหลืออยู่
- เพิ่มค่า  $m_1$  ถ้าหากว่าลักษณะการกระจายความเข้มข้นของโซนที่ 4 ณ เวลาท้ายคาบของการเลื่อนตำแหน่งตั้งสารเข้าออกจากระบบมีผลิตภัณฑ์เอ็กซ์แทรกเหลืออยู่

3. เปลี่ยนค่า  $t_p$  ซึ่งจะทำให้ค่า  $u_j$  เปลี่ยนตามโดยให้ค่า  $m_j$  คงที่ เพื่อศึกษาผลของค่า  $D_L$  ที่มีต่อสมรรถนะในการแยกของระบบ SMB
4. เปลี่ยนค่าความยาวที่ใช้ในแต่ละโซน เพื่อศึกษาผลของความยาวโซนต่อสมรรถนะในการแยกของระบบ SMB
5. เพิ่มจำนวนคอลัมน์ในแต่ละโซนเป็น 2-6 คอลัมน์ตามลำดับ
6. เปลี่ยนค่า  $m_j$  ในทั้ง 4 โซน
7. เปลี่ยนระบบตัวดูดซับ-ตัวคายการดูดซับเป็นอีก 3 คู่ที่เหลือ แล้วทำการทดลองซ้ำข้อ 1-6