

## บทที่ 5

### ผลการปรับตัวแปรของแบบจำลองและการทดสอบแบบจำลอง

ในบทนี้ ผลการปรับค่าตัวแปรที่เหมาะสมของแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์กล่าวถึงในหัวข้อที่ 5.1 ส่วนหัวข้อที่ 5.2 กล่าวถึงผลการทดสอบแบบจำลองที่ได้ปรับตัวแปรแล้วโดยทำการเปรียบเทียบโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองและที่ได้มาจากการปฏิบัติการจริงในสภาวะปฏิบัติการอื่น และผลการทำนายโพรไฟล์ของความเข้มข้นที่ได้จากการทำนายของแบบจำลอง สำหรับโพรไฟล์ ของอุณหภูมิในแนวรัศมีแสดงในหัวข้อที่ 5.3 ตามลำดับ และในหัวข้อที่ 5.4 จะเป็นการสรุปผลของการจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ซึ่งในการจำลองแบบจำลองนั้นจะเริ่มต้นด้วยการใช้ค่าตัวแปรที่มีการใช้งานวิจัยมาก่อนหน้านี้แล้วเพื่อทดสอบการทำงานของแบบจำลองก่อนจากนั้นจึงเริ่มการปรับตัวแปรต่างเพื่อให้ได้ผลการจำลองที่ใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการปฏิบัติการจริง

สำหรับตัวแปรต่างๆที่ใช้ในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์เพื่อใช้ในการทำนายแบบจำลองนั้นแสดงในตารางที่ 5.1 ส่วนการคำนวณแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ในงานวิจัยนี้จะใช้โปรแกรมบอร์แลนดี C++ 5.02 ช่วยในการคำนวณ ผลการทำนายแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ที่มีการคิดจลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบ ดีแอกติเวชัน-รีแอกติเวชัน โดยใช้วิธีการแก้ปัญหาเชิงตัวเลขแบบผลต่างสืบเนื่องร่วมกับระเบียบวิธีรุงเง-คุตดา

ในระบบเครื่องปฏิกรณ์และตัวเร่งปฏิกิริยาแบบนี้ จะแสดงสภาวะปฏิบัติการคงตัวได้หลายสภาวะ โดยที่สภาวะปฏิบัติการดังกล่าวนี้มีสาเหตุมาจากกระบวนการดูดซับแบบผันกลับได้ของสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคง ซึ่งขึ้นอยู่กับประวัติการใช้งานของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนั้นเพื่อแก้ปัญหานี้ จึงได้มีการเสนอใช้ตัวแปร  $a_m$  เพื่อชดเชยการสูญเสียพื้นที่ที่มีความว่างไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยาจากสาเหตุของการเสื่อมความว่างไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับไม่ได้ ซึ่งก็คือการเสื่อมความว่างไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้โดยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคง สมการความว่างไวในการเกิดปฏิกิริยาที่ใช้ในการจำลองสำหรับงานวิจัยนี้คือสมการที่ 3.18 ที่เสนอโดย Mongkhonsi(1994) ซึ่งแสดงได้ดังต่อไปนี้

$$\frac{da}{dt} = -k_1 P_{ox} a + k_2 P_{o2} (a_m - a)$$

ตารางที่ 5.1 ตัวแปรที่ใช้ในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์

อุณหภูมิก๊าซขาเข้า ( $T_0$ )	340	$^{\circ}\text{C}$
อุณหภูมิแก๊สไหลเวียน ( $T_w$ )	354	$^{\circ}\text{C}$
อัตราการไหลของก๊าซขาเข้า ( $F_T$ )	3.75	$\text{Nm}^3 / \text{hr tube}$
ความเข้มข้น o-xylene ขาเข้า ( $C_0$ )	60-65	$\text{g} / \text{Nm}^3$
ความดันปฏิบัติการของเครื่องปฏิกรณ์	1	$\text{atm(abs)}$
ความดันย่อยของออกซิเจน ( $P_{O_2}$ )	0.21	$\text{atm}$
เส้นผ่าศูนย์กลางภายในของท่อ ( $d_i$ )	25	$\text{mm}$
ความยาวของชั้นเบด (L)	2.75	$\text{m}$
ค่าความร้อนจำเพาะของก๊าซ ( $c_p$ )	1.092	$\text{kJ} / \text{kg K}$
ขนาดเส้นผ่าศูนย์กลางของตัวเร่งปฏิกิริยา ( $d_p$ )#	8	$\text{mm}$
ความหนาแน่นของก๊าซ ( $\rho_g$ )	1.17	$\text{kg} / \text{m}^3$
ความหนาแน่นของตัวเร่งปฏิกิริยา ( $\rho_b$ )	880	$\text{kg} / \text{m}^3$
ค่า Peclet number for mass transfer ( $Pe_{m,r}$ )*	10.0	
มวลโมเลกุลเฉลี่ยของก๊าซ ( $M_m$ )	76.45	$\text{kg} / \text{kmol}$
ค่า void fraction ของชั้นเบด	0.5	
ค่าความร้อนของปฏิกิริยา ( $-\Delta H_R$ ) *		
- ชั้นตอน OX $\rightarrow$ OT	$455.6 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{kmol}$
- ชั้นตอน OT $\rightarrow$ PT	$413.8 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน PT $\rightarrow$ PA	$367.8 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน OX $\rightarrow$ PA	$1237.3 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน OX $\rightarrow$ CO	$2299.0 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน OX $\rightarrow$ CO <sub>2</sub>	$4560.4 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน PA $\rightarrow$ CO	$1061.7 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$
- ชั้นตอน PA $\rightarrow$ CO <sub>2</sub>	$3323.1 \times 10^3$	$\text{kJ} / \text{mol}$

หมายเหตุ \* ข้อมูลจากงานวิจัยของ Mongkhonsi (1994)

# ประมาณเส้นผ่าศูนย์กลางเทียบเท่า

ขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของ o-xylene โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิด  $V_2O_5/TiO_2$  ที่ใช้สำหรับงานวิจัยนี้นั้นได้ตั้งสมมุติฐานให้เป็นไปตามผลงานวิจัยที่ผ่านซึ่งได้ศึกษางานวิจัยในลักษณะเดียวกันแต่อาจมีปริมาณของสารที่มีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาในแต่ละขั้นตอนของการเกิดปฏิกิริยาแตกต่างกัน ดังนั้นจึงสมมุติให้ค่าของ activation energy ที่ได้จากงานวิจัยที่ผ่านมายังใช้ได้อยู่ แต่ค่าตัวแปร pre-exponential ต้องมีการปรับชดเชยโดยจะอยู่ในรูปของค่า  $a_m$  ซึ่งในงานวิจัยนี้นั้นทุกผลการจำลองที่นำเสนอจะใช้ตัวแปร  $a_m$  เป็นตัวแปรที่ใช้ปรับข้อมูลให้เหมาะสมเพื่อที่จะทำให้การแสดงผลการทำนายเป็นอย่างมีคุณภาพ ด้วยการเลือกค่า  $a_m$  ที่เหมาะสม เนื่องจากเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ มีการบรรจุตัวเร่งปฏิกิริยาไว้สองชั้นเบด โดยที่ชั้นเบดบน มีค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาจะต่ำกว่าชั้นเบดล่าง ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงใช้ค่า  $a_m$  ที่ต่างกันระหว่างชั้นเบดบน และชั้นเบดล่าง และค่า  $a_m$  ในแต่ละขั้นตอนของการเกิดปฏิกิริยา ที่เสนอโดย Calderbank(1977) จะมีค่าที่ต่างกัน โดยที่ค่า  $a_m$  ในชั้นเบดบนจะต้องมีค่าน้อยกว่าชั้นเบดล่างเพราะชั้นเบดบนมีค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาต่ำกว่าชั้นเบดล่างและต้องเป็นค่าที่ทำให้อัตราการเปลี่ยนรูปของ o-xylene ไปเป็นผลิตภัณฑ์มีค่าประมาณ 98-100 % ที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์ รายละเอียดของค่า  $a_m$  ที่เลือกใช้ในแบบจำลองของงานวิจัยนี้แสดงในตารางที่ 5.2

ตารางที่ 5.2 ค่า  $a_m$  ที่เลือกใช้สำหรับการจำลองแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์

STEP	Maximum activity available( $a_m$ )	
	ชั้นเบดบน	ชั้นเบดล่าง
OX>OT	0.65	1.0
OX>PA	0.45	1.0
OX>COM	0.05	0.5
OT>PT	0.40	1.0
PT>PA	0.6	1.0

### 5.1 การปรับค่าตัวแปรที่เหมาะสมของแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์

ในการปรับตัวแปรของแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้นั้นได้ทำการจำลองโดยใช้สภาวะการปฏิบัติการที่ความเข้มข้นขาเข้าของ o-xylene  $65 \text{ g/Nm}^3$  และใช้ค่า  $a_m$  จากตารางที่ 5.2 สำหรับตัวแปรที่มีผลต่อการเปลี่ยนแปลงพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งจำเป็นต้องปรับให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้มีดังต่อไปนี้

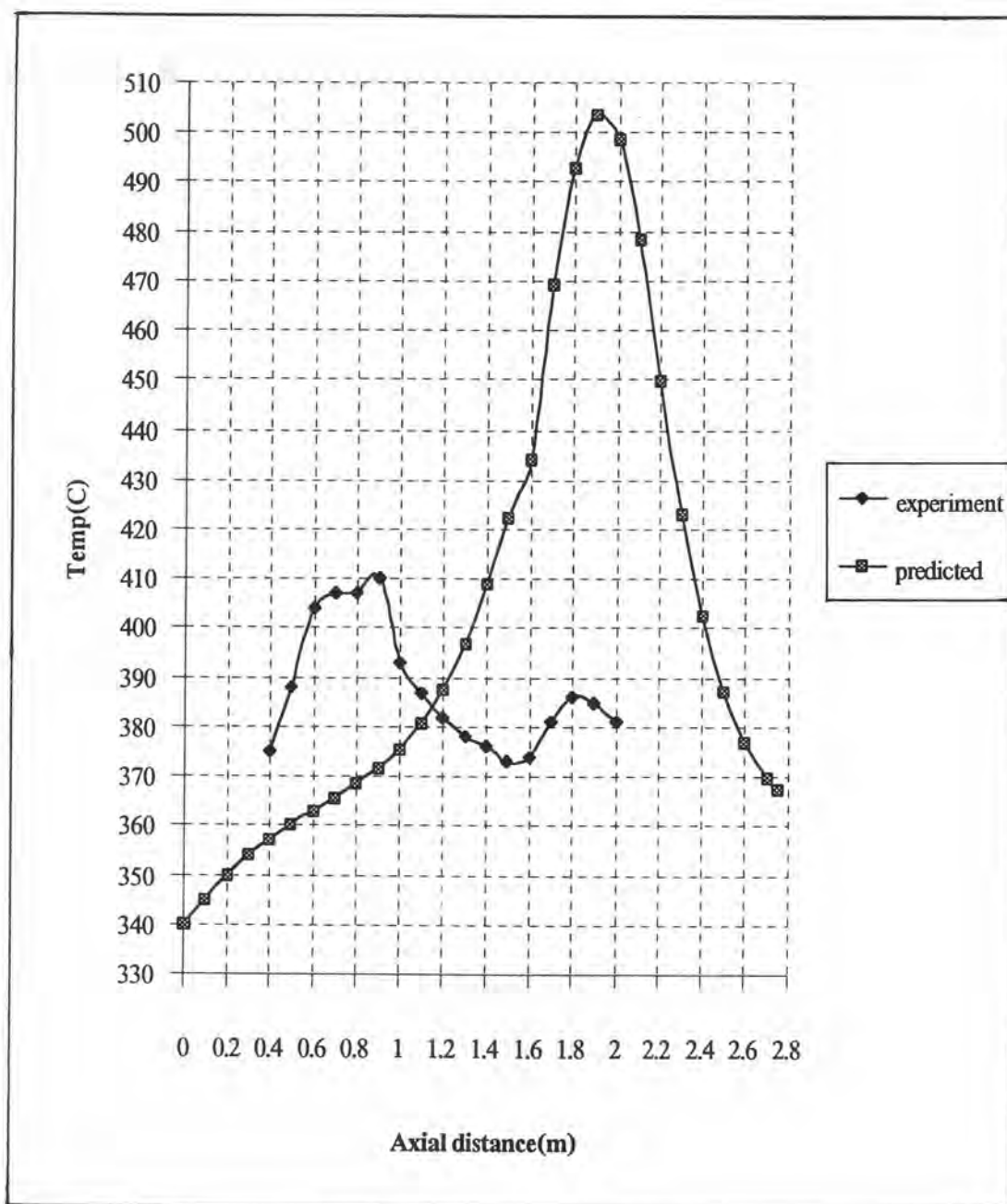
- 1) Biot number ( $Bi_w$ ) ซึ่งนิยามได้ดังนี้
 
$$Bi_w = (h_w R_o / k_{cr})$$
- 2) radial pecelet number of heat transfer ( $Pe_{tr}$ ) ซึ่งนิยามได้ดังนี้
 
$$Pe_{tr} = \epsilon u \rho_g c_{p,g} d_p / k_{cr}$$
- 3) ค่าจลนพลศาสตร์การเชื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา ( $k_{1,0}$ ) จากสมการที่ 3.16

ในเบื้องต้นนั้นค่าตัวแปรค่าคงที่สำหรับการถ่ายเทความร้อนจะใช้ค่าที่ได้จากการทดลองของ Lopez-Izunsu (1983) [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ส่วนค่าจลนพลศาสตร์การเชื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาจะใช้ค่าของ Mongkhonsi (1994) เป็นตัวแปรอ้างอิงในการปรับตัวแปรเหล่านี้ให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ ทั้งนี้เพราะในงานดังกล่าวทำการศึกษาในช่วงอุณหภูมิเดียวกันและขนาดท่อของเครื่องปฏิกรณ์มีขนาดเดียวกับที่ใช้ในอุตสาหกรรม โดยที่ค่าตัวแปรเหล่านี้จะมีค่าคงต่อไปนี้

$Bi_w$	0.8
$Pe_{tr}$	11.5
$\ln(k_{1,0})$	-1.5

โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการจำลองโดยใช้ตัวแปรดังกล่าวเปรียบเทียบกับโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการปฏิบัติการจริง แสดงในรูปที่ 5.1 และโพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ได้จากการจำลองแบบจำลองแสดงในรูปที่ 5.2

ในรูปที่ 5.1 นั้นแสดงโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการปฏิบัติการจริงของเครื่องปฏิกรณ์นั้น จะมีลักษณะที่อุณหภูมิจะเพิ่มขึ้นตามความลึกของชั้นเบดจนมีค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดประมาณ  $410\text{ }^{\circ}\text{C}$  ที่ความลึกของชั้นเบด 0.9 ม. ซึ่งเป็นตำแหน่งอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรก เมื่อผ่านจุดนี้ไปอุณหภูมิลดต่ำลงจนผ่านเข้าไปสู่ชั้นเบดที่สองอุณหภูมิก็จะเริ่มเพิ่มขึ้นจนมีค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด ประมาณ  $386\text{ }^{\circ}\text{C}$  ที่ความลึกของชั้นเบด 1.8 ม. ซึ่งเป็นตำแหน่งอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สอง เมื่อผ่านจุดนี้ไปอุณหภูมิลดต่ำลง โพรไฟล์ของอุณหภูมิที่มีลักษณะเช่นนี้เพราะว่าค่าความว่องในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยาในชั้นเบดที่สองจะมีค่าสูงกว่าในชั้นเบดแรก ดังนั้นเมื่อ o-xylene ที่เหลือจากการทำปฏิกิริยาในชั้นเบดแรกจะเกิดปฏิกิริยาขึ้นอีกครั้งหนึ่งในชั้นเบดที่สองทำให้อุณหภูมิในชั้นเบดที่สองเพิ่มขึ้นอีก ส่วนโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้มาจากการจำลองนั้นอุณหภูมิจะเพิ่มขึ้นไปสูงสุดประมาณ  $503\text{ }^{\circ}\text{C}$  ที่ความลึกของชั้นเบด 1.9 ม. ซึ่งอยู่ในชั้นเบดที่สองในขณะที่ชั้นเบดแรกไม่มีตำแหน่งของอุณหภูมิสูงสุด



รูปที่ 5.1 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกน ที่ความเข้มข้น o-xylene 65 g/Nm<sup>3</sup>

$$Bi_w = 0.8, Pe_{br} = 11.5, \ln(k_{1,0}) = -1.5$$



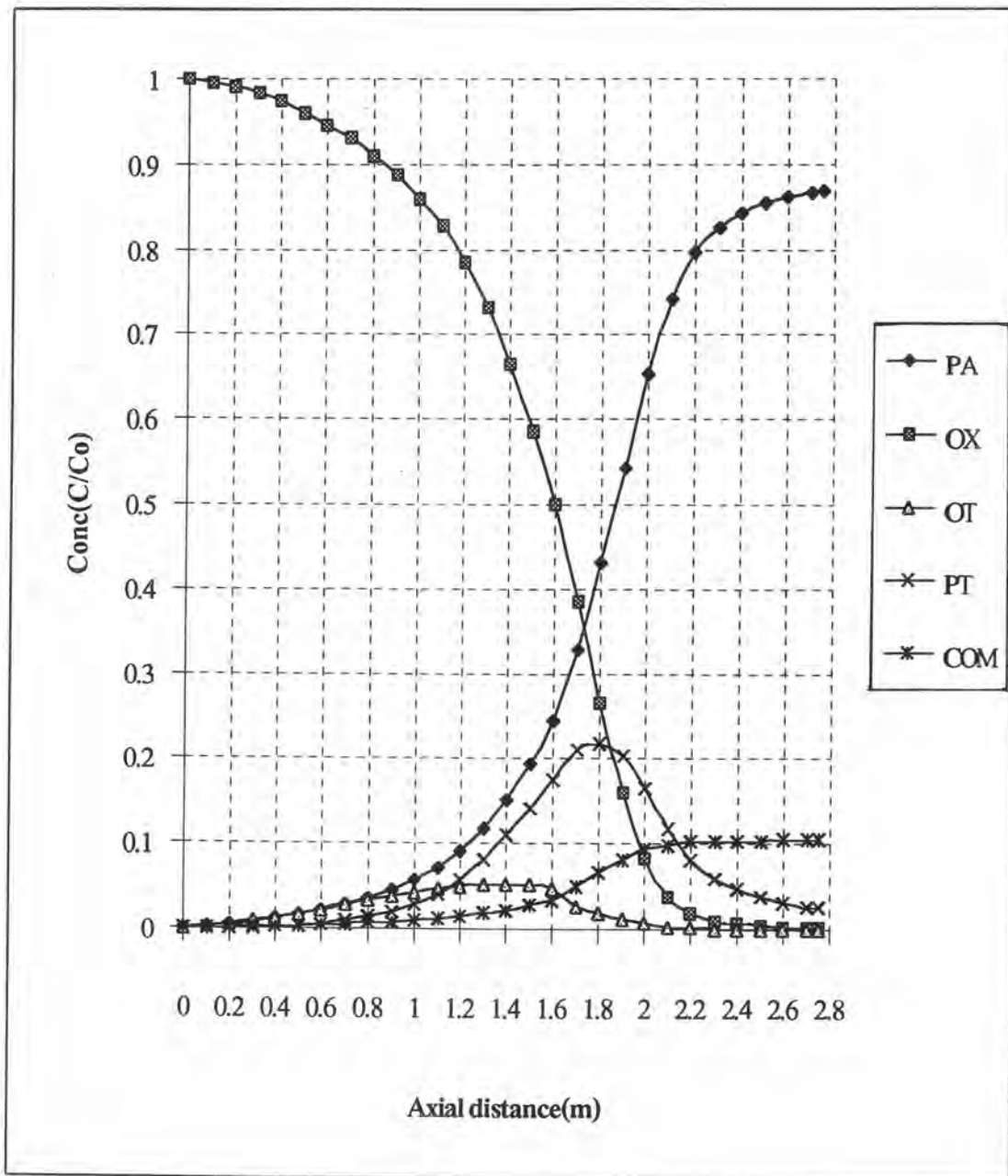
รูปที่ 5.2 ซึ่งแสดงโพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองนั้นจะมีลักษณะที่สอดคล้องกับโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองในรูปที่ 5.1 กล่าวคือการหายไปของ *o*-xylene และการเกิดเป็นผลิตภัณฑ์นั้นจะมีมากในบริเวณที่เกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดซึ่งเกิดขึ้นในชั้นเบดที่สอง และพบว่าความเข้มข้นของ *o*-tolualdehyde และ phthalide จะเพิ่มขึ้นจนถึงจุดสูงสุดแล้วจึงลดลงจนเกือบคงที่ที่บริเวณทางออกเครื่องปฏิกรณ์ ในขณะที่ความเข้มข้นของ COM จะค่อยเพิ่มขึ้นจนถึงสูงสุดจากนั้นจะคงที่จนถึงบริเวณทางออกเครื่องปฏิกรณ์

จากการเปรียบเทียบผลของโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองกับที่ได้จากปฏิบัติการจริงพบว่ายังมีความคลาดเคลื่อนกันเป็นอย่างมากของโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนทั้งขนาดและตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด ซึ่งแสดงให้เห็นว่าตัวแปรที่ใช้ในแบบจำลองยังไม่เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ดังนั้นจึงจำเป็นต้องมีการปรับตัวแปรเหล่านี้ให้เหมาะสมต่อไป

### 5.1.1 การปรับค่าจลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา ( $k_{1,0}$ )

ค่าตัวแปรจลนพลศาสตร์ในสมการแบบจำลองค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่เสนอโดย Mongkhonsi(1994) ซึ่งแสดงในสมการที่ 3.16 และ 3.18 นั้นจะมีค่าดังต่อไปนี้  $E_{a1}/R \approx 3600$  ,  $E_{a2}/R \approx 30000$  K และ  $\ln(k_{1,0}) \approx -1.5$  ,  $\ln(k_{2,0}) \approx 35.4$  โดยค่าตัวแปรที่จำเป็นต้องปรับคือ  $k_{1,0}$  เนื่องจากค่าตัวแปรนี้เกี่ยวข้องกับพจน์แรกทางขวามือของสมการที่ 3.18 ซึ่งเป็นพจน์ที่แสดงถึงอัตราการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนั้นค่าตัวแปร  $k_{1,0}$  จะมีผลต่อพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ทั้งขนาดและตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด จากโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายในรูปที่ 5.1 แสดงให้เห็นว่าปฏิกิริยาไม่ค่อยเกิดในชั้นเบดแรกของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนั้นในการปรับค่าตัวแปร  $k_{1,0}$  จะทำการปรับในชั้นเบดแรกเพื่อเร่งให้เกิดปฏิกิริยาขึ้นในชั้นเบดแรกเท่านั้น ส่วนในชั้นเบดที่สองนั้นไม่จำเป็นต้องปรับเพราะสามารถเกิดปฏิกิริยาได้ ดังนั้นในส่วนนี้จะผันแปรค่าของ  $k_{1,0}$  เฉพาะในชั้นเบดแรก ในขณะที่ชั้นเบดที่สองยังคงมีค่า  $\ln(k_{1,0}) = -1.5$  และค่าของ  $Bi_w$  และ  $Pe_w$  ยังคงไม่เปลี่ยนแปลง โดยผลการผันแปรค่าของ  $\ln(k_{1,0})$  เป็น -1.0 และ -2.7 ตามลำดับแสดงในรูปที่ 5.3-5.5

รูปที่ 5.3 แสดงผลการเปรียบเทียบของโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองที่ค่า  $k_{1,0}$  ในชั้นเบดแรกต่างกันและผลที่ได้จากจากการทดลองปฏิบัติการเครื่องปฏิกรณ์ โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการจำลองที่มีการผันแปรค่า  $k_{1,0}$  ในชั้นเบดแรก



รูปที่ 5.2 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกน ที่ความเข้มข้น  $65 \text{ g/Nm}^3$

$$Bi_w = 0.8, Pe_{hr} = 11.5, \ln(k_{1,0}) = -1.5$$

ต่างกัน จะให้ผลดังนี้ คือเมื่อเพิ่มค่าของ  $\ln(k_{1,0})$  จาก  $-1.5$  เป็น  $-1.0$  ค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดมีค่าเพิ่ม  $530^\circ\text{C}$  และตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนได้เคลื่อนลงไปที่มีความลึกชั้นเบดประมาณ  $2.2$  ม. แต่เมื่อมีการลดค่าของ  $\ln(k_{1,0})$  ไปเป็น  $-2.7$  ตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดได้เลื่อนขึ้นมาที่ชั้นเบดแรกที่มีความลึกประมาณ  $1.0$  ม. ซึ่งอยู่ในชั้นเบดแรก ส่วนค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดมีค่าลดลงเป็น  $461^\circ\text{C}$

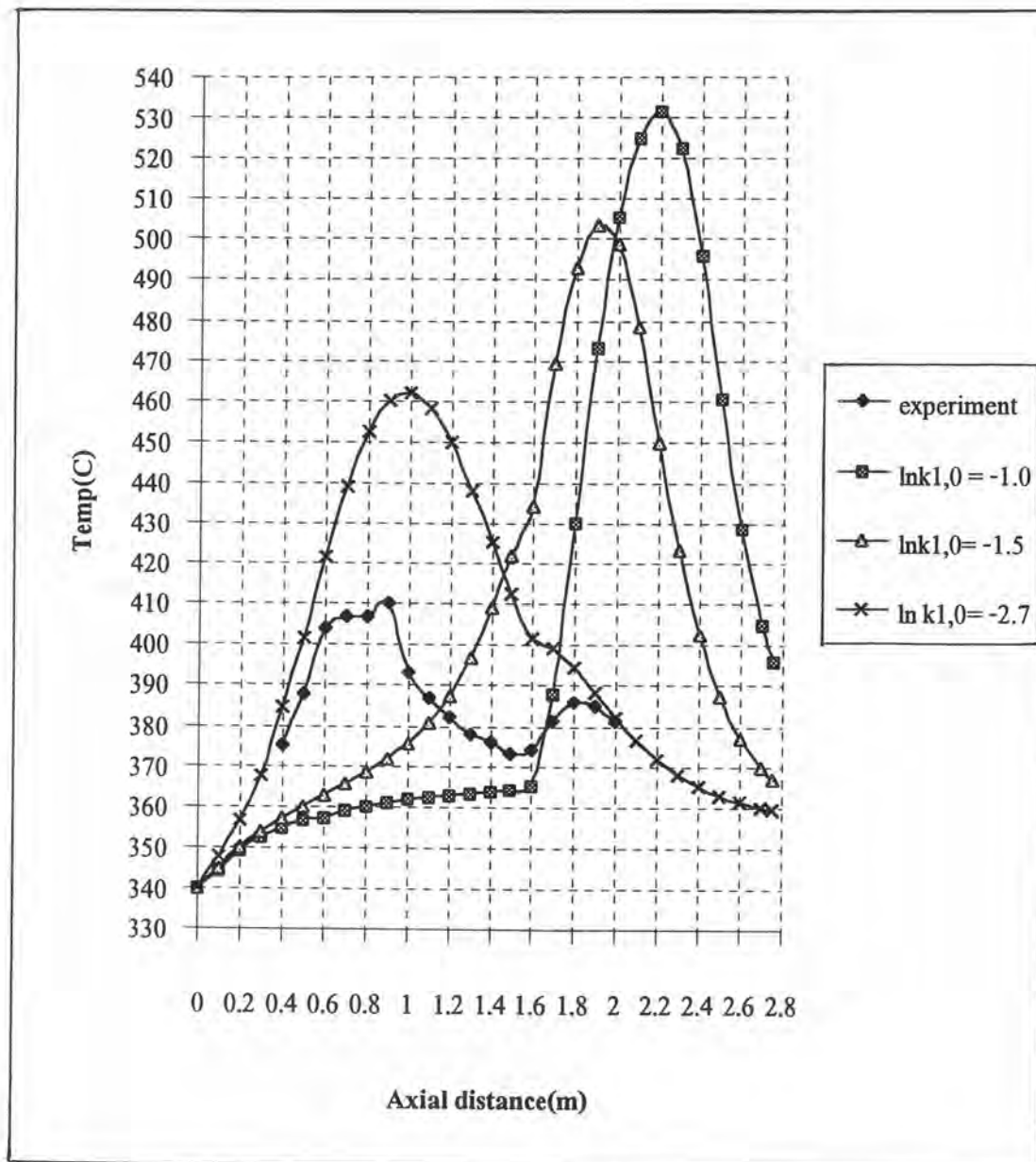
รูปที่ 5.4-5.5 แสดงรูปแบบความเข้มข้นของผลิตภัณฑ์และสารตั้งต้นในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองที่มีค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -1$  และ  $-2.7$  ตามลำดับ ซึ่งพบว่าความเข้มข้นที่ลดลงของ *o*-xylene และความเข้มข้นที่เพิ่มขึ้นของ phthalic anhydride ที่ค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -1.0$  จะเกิดขึ้นในชั้นเบดที่สองเป็นส่วนใหญ่ ในขณะที่เมื่อค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -2.7$  ความเข้มข้นที่ลดลงของ *o*-xylene และความเข้มข้นที่เพิ่มขึ้นของ phthalic anhydride จะเกิดขึ้นในชั้นเบดแรกเป็นส่วนใหญ่และความเข้มข้นที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์ของ phthalic anhydride จะมีค่าที่สูงกว่าในขณะที่ความเข้มข้นของ COM, *o*-tolualdehyde, phthalide จะมีค่าที่ต่ำกว่า

จากผลการผันแปรค่าของ  $\ln(k_{1,0})$  นั้นแสดงให้เห็นว่าค่า  $(k_{1,0})$  มีผลต่อพฤติกรรมของการเกิดปฏิกิริยาของ *o*-xylene ซึ่งทำให้ตำแหน่งและขนาดของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดมีการเปลี่ยนแปลง ดังนั้นสำหรับงานวิจัยนี้จึงเลือกค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -2.7$  เป็นค่าตัวแปรที่เหมาะสมสำหรับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ เพราะมีตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรกใกล้เคียงกันกับผลที่ได้จากการปฏิบัติการจริง ถึงแม้ว่าจะไม่มีตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สองนั้นแสดงว่า *o*-xylene ได้เกิดปฏิกิริยาขึ้นในชั้นเบดแรกเกือบทั้งหมด จึงทำให้เกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันที่รุนแรงซึ่งส่งผลให้ค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรกมีค่าที่สูงกว่าค่าที่ได้จากการปฏิบัติการจริงมาก สำหรับปัญหานี้สามารถแก้ไขได้โดยการปรับค่าของค่าคงที่สำหรับการถ่ายเทความร้อน เพื่อลดความรุนแรงของการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันในชั้นเบดแรกซึ่งจะส่งผลให้มี *o*-xylene เหลือไปเกิดปฏิกิริยาในชั้นเบดที่สองเพียงพอที่จะทำให้เกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สองเกิดขึ้นได้และสามารถลดค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรกลงได้

### 5.1.2 ผลการปรับค่า biot number ( $Bi_w$ ) และค่า radial pecllet number of heat transfer ( $Pe_{hr}$ )

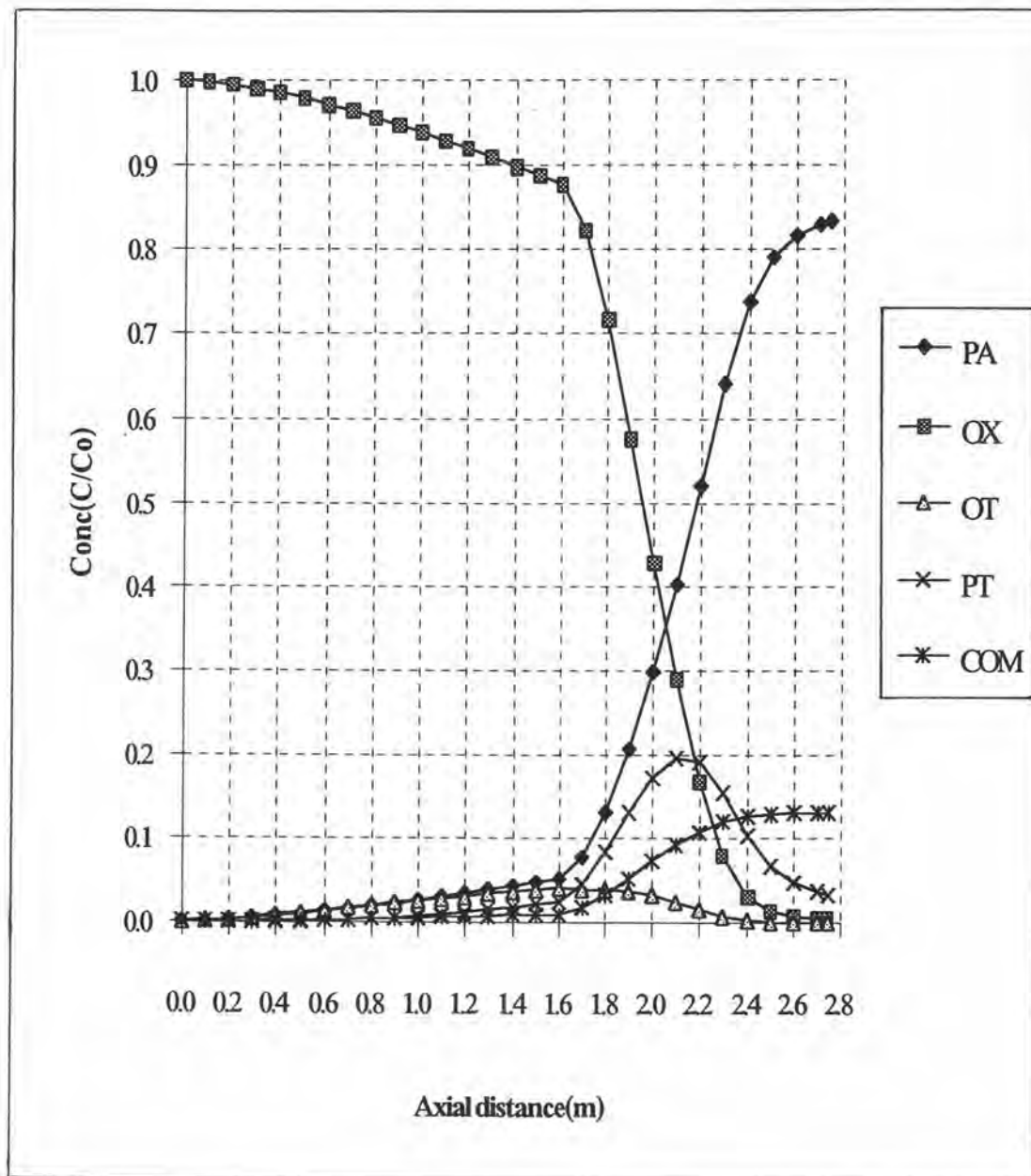
ในหัวข้อนี้จะเป็นการปรับค่าของค่า  $Bi_w$  และค่า  $Pe_{hr}$  เพื่อลดความรุนแรงของการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันของ *o*-xylene ในชั้นเบดแรก จากการนิยามของค่า  $Bi_w$  และค่า  $Pe_{hr}$  นั้นจะขึ้นอยู่กับค่าการนำความร้อนจำเพาะในชั้นเบด ( $k_{hr}$ ) โดยทั้งสองค่าจะเป็นสัดส่วนผกผันกับค่า  $k_{hr}$  ดังนั้นเมื่อมีการเปลี่ยนค่าของ  $Pe_{hr}$  จะทำให้ค่าของ  $Bi_w$  เปลี่ยนตามไปด้วย โดยที่ในการปรับค่าของค่า





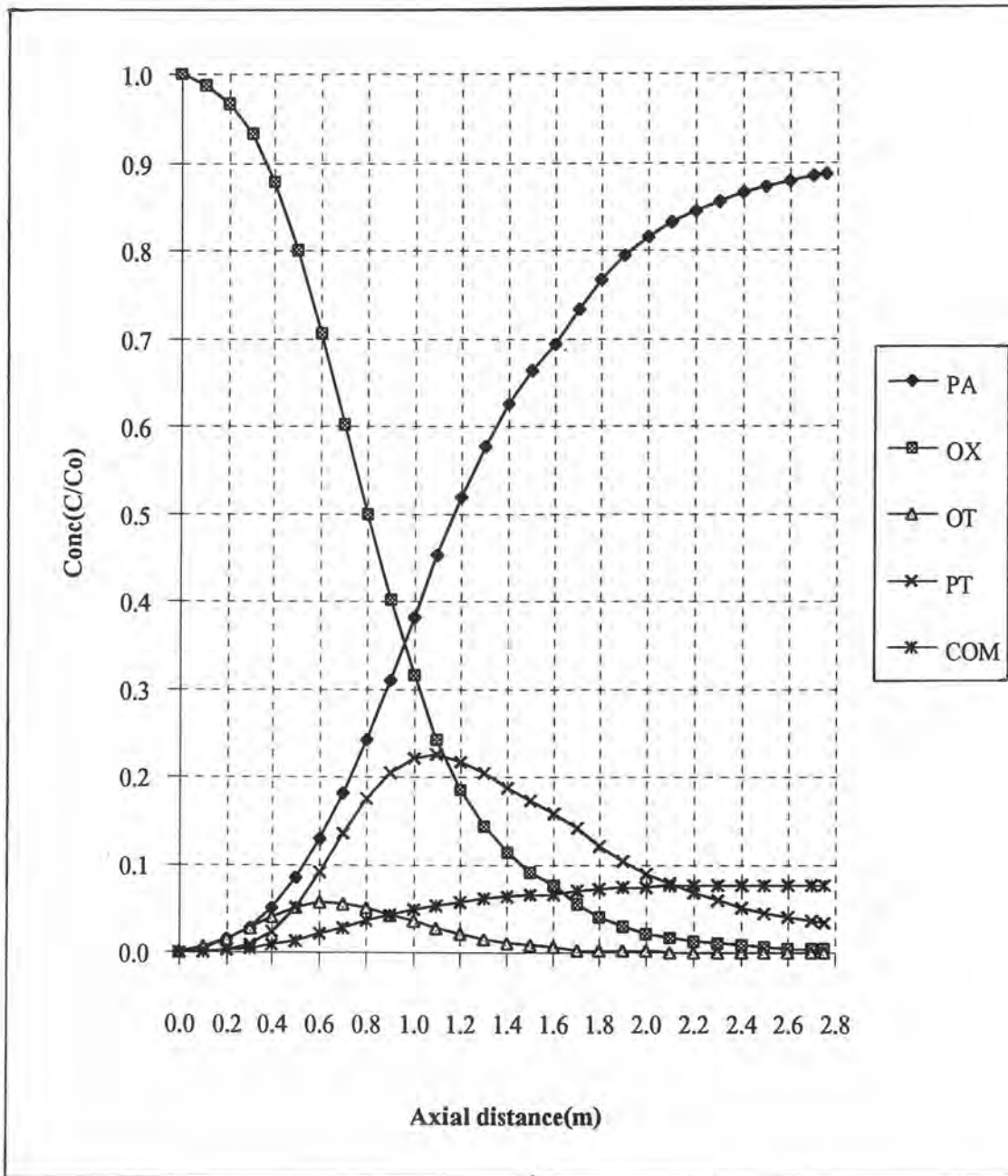
รูปที่ 5.3 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 65 g/Nm<sup>3</sup>

$$Bi_w = 0.8, Pe_{hr} = 11.5$$



รูปที่ 5.4 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene  $65 \text{ g/Nm}^3$

$$Bi_w = 0.8, Pe_{br} = 11.5, \ln(k_{1,0}) = -1.0$$



รูปที่ 5.5 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 65 g/Nm<sup>3</sup>

$$Bi_w = 0.8, Pe_{nr} = 11.5, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$

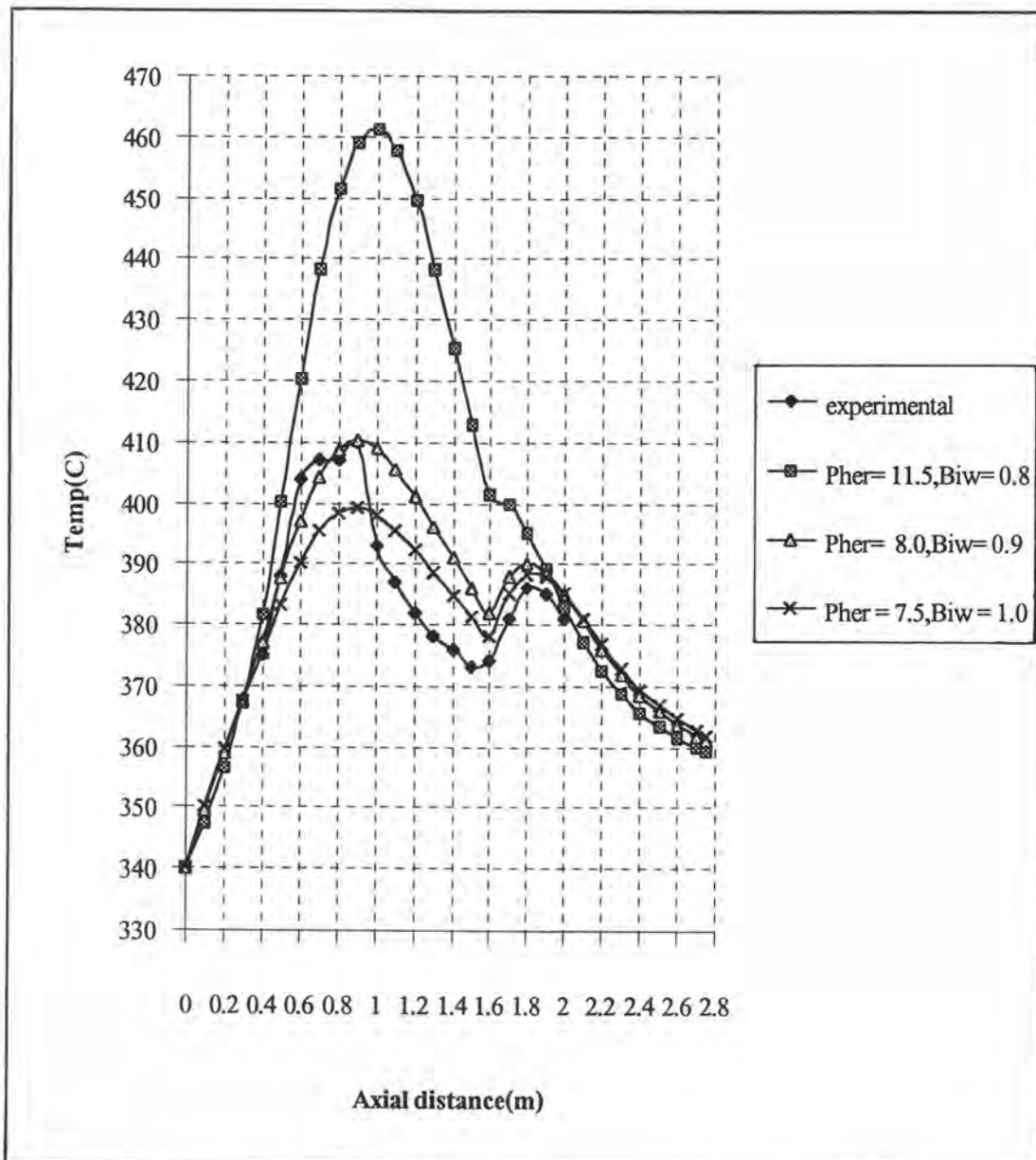
$Bi_w$  และค่า  $Pe_{hr}$  ในแบบจำลองนั้นจะใช้ค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -2.7$  ในชั้นเบคแรก และค่า  $\ln(k_{1,0}) = -1.5$  ในชั้นเบคที่สอง

ตัวแปร  $Bi_w$  นั้นเป็นตัวแปรค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนที่ได้จากการสมมุติให้พื้นที่ผนังของของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนเป็นค่าเดียวกันทั้งหมดภายในเครื่องปฏิกรณ์ ค่าของ  $Bi_w$  ที่เหมาะสมสามารถหาได้โดยการเปรียบเทียบผลการจำลองกับผลที่ได้จากการทดลอง สำหรับค่าตัวแปร  $Bi_w$  นั้นแสดงถึงความสามารถในการถ่ายเทความร้อนจากผนังท่อของเครื่องปฏิกรณ์เนื่องจากค่าคงที่การถ่ายเทความร้อนที่ผนังท่อ ( $h_w$ ) จะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับค่าตัวแปร  $Bi_w$  ดังนั้นเมื่อค่าของตัวแปร  $Bi_w$  มีค่าสูงขึ้นแสดงว่ามีความสามารถในการถ่ายเทความร้อนจากผนังท่อของเครื่องปฏิกรณ์ได้ดีขึ้นซึ่งจะส่งผลให้อุณหภูมิภายในท่อของเครื่องปฏิกรณ์ต่ำลง

ตัวแปร Peclet number สำหรับการถ่ายเทความร้อน ( $Pe_{hr}$ ) แสดงถึงความต้านทานการถ่ายเทความร้อนในเบคหนึ่งเนื่องจากเป็นสัดส่วนผกผันกับค่า  $k_{hr}$  ดังนั้นถ้าหากว่าค่า  $Pe_{hr}$  มีค่าสูงขึ้นก็แสดงว่ามีค่าความต้านทานการถ่ายเทความร้อนสูงตาม ซึ่งจะทำให้โปรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนสูงกว่าในกรณีที่มีค่า  $Pe_{hr}$  ต่ำกว่า เพราะว่ามีถ่ายเทความร้อนออกจากเบคหนึ่งได้น้อยลง

เนื่องจากค่าของ  $Pe_{hr}$  และค่าของ  $Bi_w$  นั้นเกี่ยวพันกันอยู่ ดังนั้นในการปรับค่าที่เหมาะสมนั้นจะทำการปรับพร้อมกันทั้งคู่ สำหรับค่า  $Pe_{hr}$  จะทำการปรับค่าลดลงจากค่าอ้างอิงคือที่ 11.5 ส่วนค่า  $Bi_w$  จะทำการปรับค่าเพิ่มขึ้นจากค่าอ้างอิงคือ 0.8 ซึ่งผลการจำลองแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ที่มีการผันแปรค่า  $Bi_w$  และค่า  $Pe_{hr}$  นั้นแสดงในรูปที่ 5.6-5.8

รูปที่ 5.6 แสดงโปรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการทำนายแบบจำลองที่มีการผันแปรค่าของ  $Pe_{hr}$  และ ค่าของ  $Bi_w$  ต่างๆกันเปรียบเทียบกับผลของโปรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการปฏิบัติการจริง ซึ่งผลที่ได้จากการจำลองจะให้ผลที่ต่างกันดังนี้คือเมื่อค่า  $Pe_{hr} = 7.5$  และ  $Bi_w = 1.0$  ผลจากการจำลองจะแสดงโปรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่มีอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดทั้งสองตำแหน่ง โดยมีค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรกประมาณ  $400^\circ\text{C}$  ซึ่งจะต่ำกว่าค่าที่ได้จากการปฏิบัติการจริง แต่มีตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดแรกตรงกันที่ความลึกของชั้นเบค 0.9 ม. ในขณะที่ค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สองประมาณ  $389^\circ\text{C}$  ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากการปฏิบัติการ  $Bi_w$  และค่า  $Pe_{hr}$  ในแบบจำลองนั้นจะใช้ค่าของ  $\ln(k_{1,0}) = -2.7$  ในชั้นเบคแรก และค่า  $\ln(k_{1,0}) = -1.5$  ในชั้นเบคที่สองตัวแปร  $Bi_w$  นั้นเป็นตัวแปรค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนที่ได้จากการสมมุติให้พื้นที่ผนังของเครื่องปฏิกรณ์มีค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนเป็นค่าเดียวกันทั้งหมดภายในเครื่องปฏิกรณ์ ค่าของ  $Bi_w$  ที่จริง และมีตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สองตรงกันที่ความลึก 1.8 ม.



รูปที่ 5.6 โฟร์ไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene  $65 \text{ g/Nm}^3$ ,  $\ln(k1,0) = -2.7$



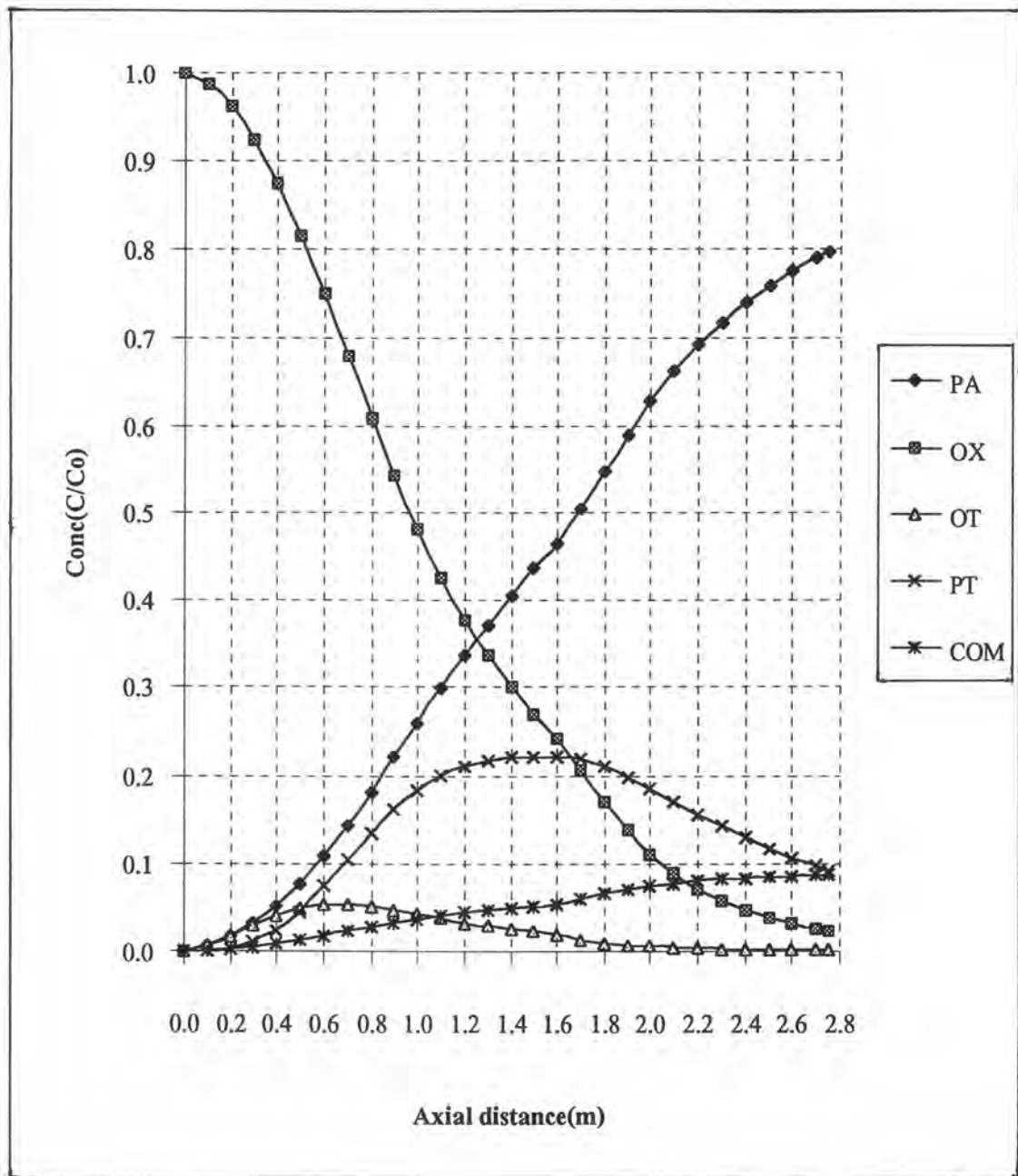
สำหรับค่าคงที่สำหรับการถ่ายเทความร้อนที่เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ ซึ่งมีโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่มีขนาดและตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดทั้งสองจุดมีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการทดลองปฏิบัติการมากที่สุดนั้นมีค่าดังต่อไปนี้  $Bi_w = 0.9$  และ  $Pe_{cr} = 8.0$

รูปที่ 5.7-5.8 แสดงโพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนของผลิตภัณฑ์และสารตั้งต้นที่ได้มาจากการทำนายแบบจำลองที่ใช้ค่า  $Bi_w = 1.0, Pe_{cr} = 7.5$  และ  $Bi_w = 0.9, Pe_{cr} = 8.0$  ตามลำดับซึ่งพบว่าในกรณีที่ใช้ค่า  $Bi_w = 1.0, Pe_{cr} = 7.5$  นั้นความเข้มข้นของ o-xylene จะลดลงช้ากว่ากรณีที่ใช้ค่า  $Bi_w = 0.9, Pe_{cr} = 8.0$  เล็กน้อยและความเข้มข้นของ phthalic anhydride ที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์จะมีค่าน้อยกว่าเล็กน้อยเช่นกัน ในขณะที่ความเข้มข้นของ COM, o-tolualdehyde, phthalide ที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์จะมีค่าที่ใกล้เคียงกัน

## 5.2 ผลการทดสอบแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้ปรับตัวแปรแล้ว

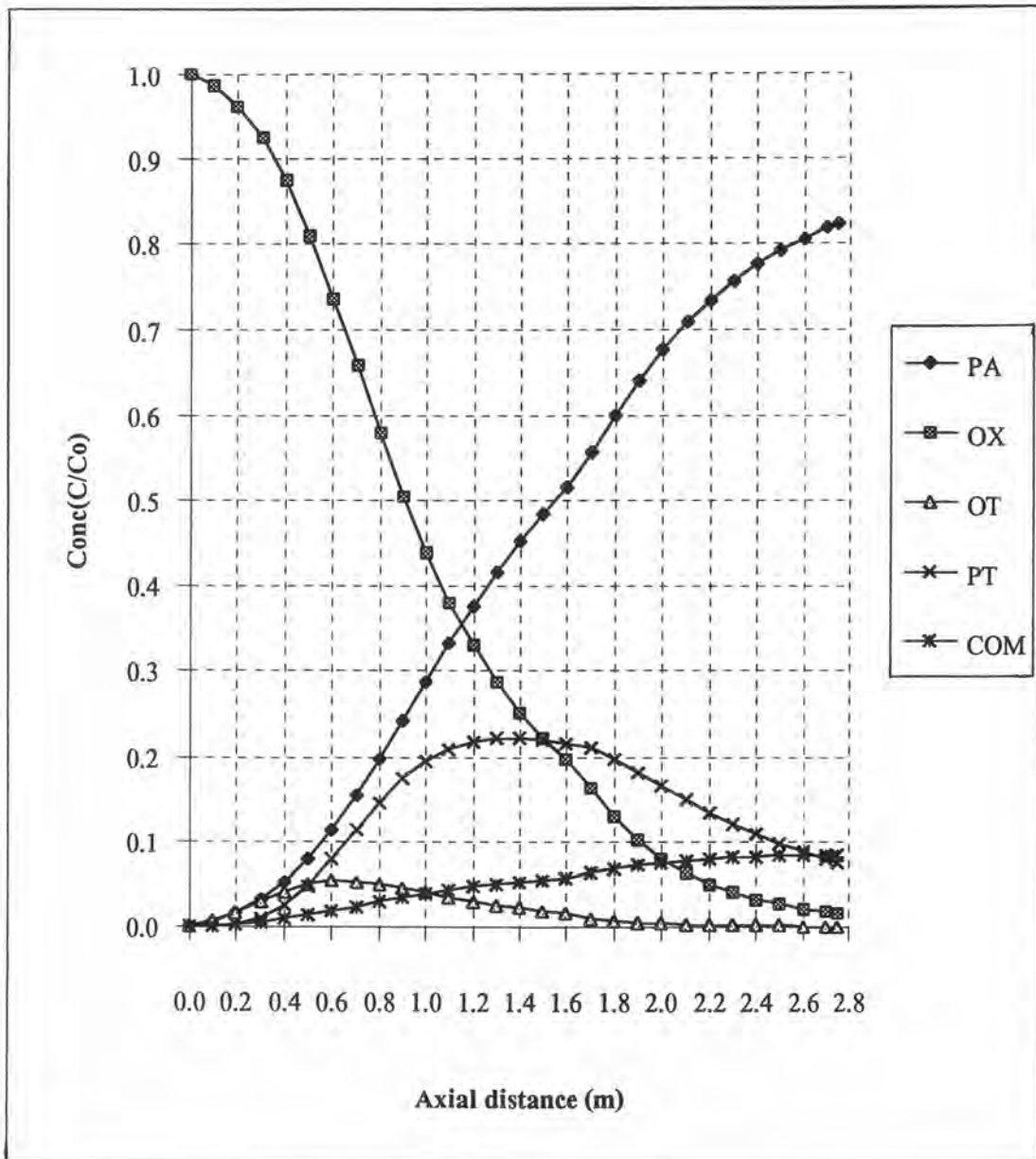
เพื่อทดสอบว่าค่าตัวแปรต่างๆที่ได้จากสภาวะปฏิบัติการหนึ่งสามารถนำไปใช้ในสภาวะปฏิบัติการอื่นได้ ดังนั้นเมื่อทำการปรับตัวแปรต่างๆในหัวข้อ 5.1 ให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้แล้วได้ทำการผันแปรความเข้มข้นของ o-xylene ป้อนเข้าเครื่องปฏิกรณ์ที่ค่าต่างๆกัน เพื่อเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการทำนายแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ที่ความเข้มข้นของ o-xylene เดียวกัน ผลการเปรียบเทียบที่แสดงในรูปที่ 5.9-5.10 นั้นเป็นการเปรียบเทียบโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้จากการจำลองและการทดลองปฏิบัติการที่ความเข้มข้นของ o-xylene ป้อนเข้าเครื่องปฏิกรณ์ 60 และ 64  $g/Nm^3$  ตามลำดับ ซึ่งแสดงให้เห็นว่าโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ได้ จากการปฏิบัติการจริงและจากการทำนายแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ที่มีการคิดจลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิริยานั้นมีความที่ใกล้เคียงกันเป็นอย่างมาก

ส่วนการทำนายโพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนโดยใช้แบบจำลองที่มีการปรับตัวแปรต่างๆให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ โดยใช้ความเข้มข้นของ o-xylene ขาเข้า 60 และ 64  $g/Nm^3$  ตามลำดับเช่นเดียวกับการทำนายโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกน ซึ่งผลการทำนายโพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนแสดงในรูปที่ 5.11-5.12 ซึ่งจะมีโพรไฟล์ของความเข้มข้นในลักษณะเดียวกันดังนี้ ความเข้มข้นที่ลดลงของ o-xylene เนื่องมาจากการเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันนั้น จะพบว่าในช่วงความลึกของชั้นเบดถึง 0.3 ม.ความเข้มข้นของ o-xylene จะค่อยลดลง และจะลดลงอย่างรวดเร็วที่ความลึกของชั้นเบดตั้งแต่ 0.3 ม.ถึง 1.2 ม. ซึ่งเป็นช่วงที่มีอุณหภูมิในการเกิดปฏิกิริยาสูง โดยที่ความเข้มข้นจะลดลงมากที่สุดที่ตำแหน่งของการเกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด จากนั้นความเข้มข้นของ o-xylene จะค่อยลดลงอีกครั้งหนึ่ง และเมื่อผ่านเข้าไปสู่ชั้นเบดที่สองตั้งแต่-



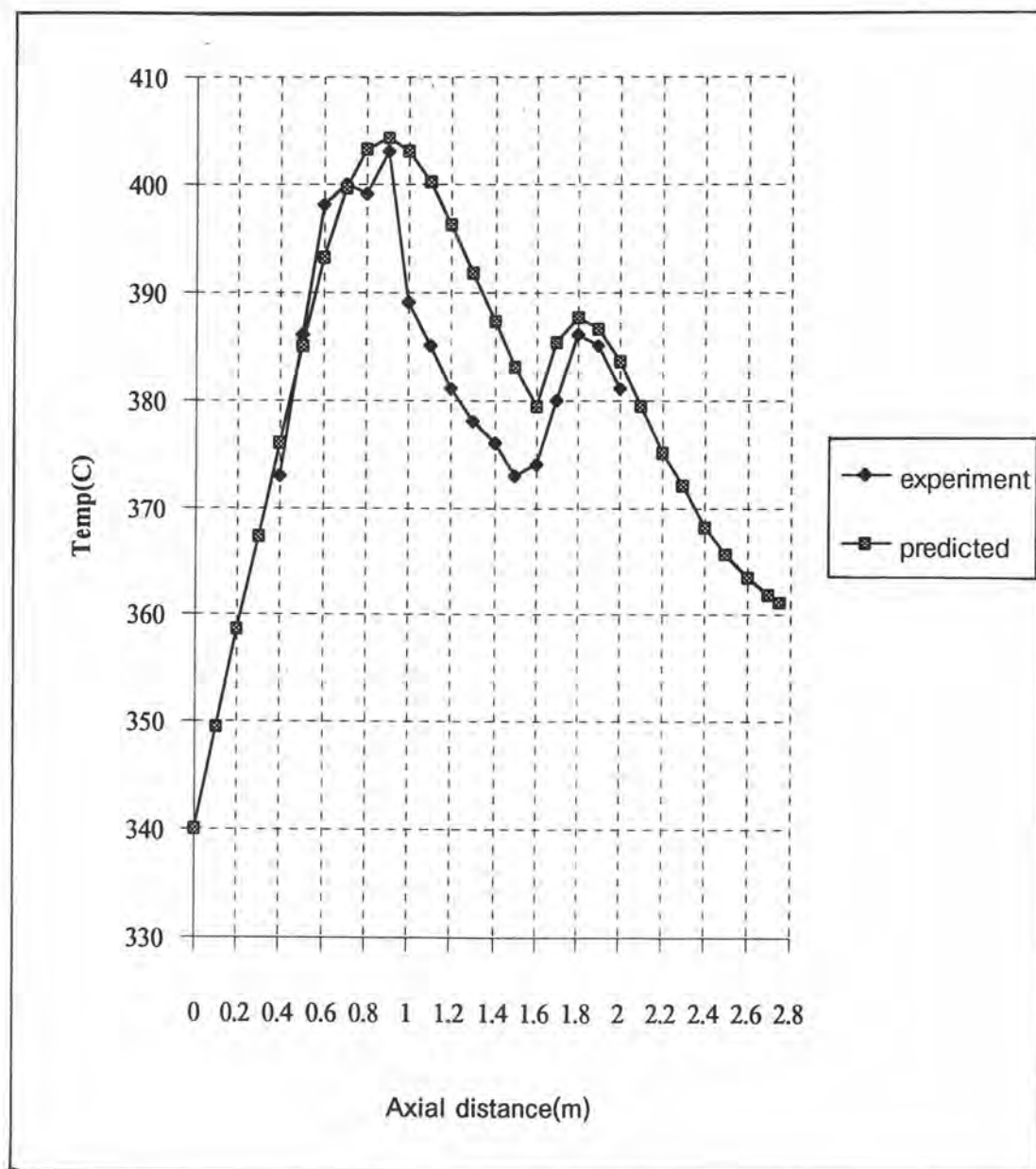
รูปที่ 5.7 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 65 g/Nm<sup>3</sup>

$$Bi_w = 1.0, Pe_{hr} = 7.5, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$



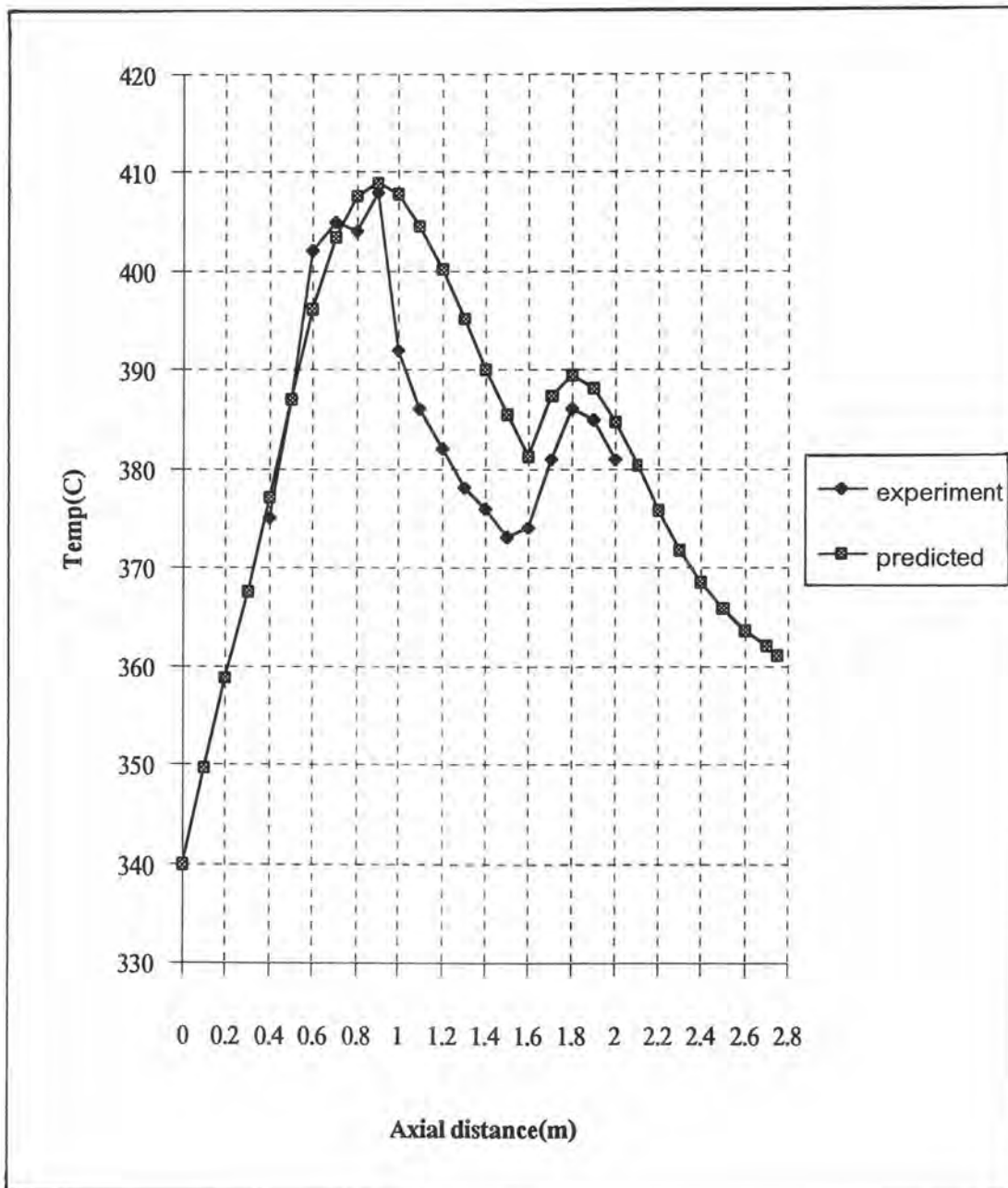
รูปที่ 5.8 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene  $65 \text{ g/Nm}^3$

$$Bi_w = 0.9, Pe_{br} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$



รูปที่ 5.9 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 60 g/Nm<sup>3</sup>

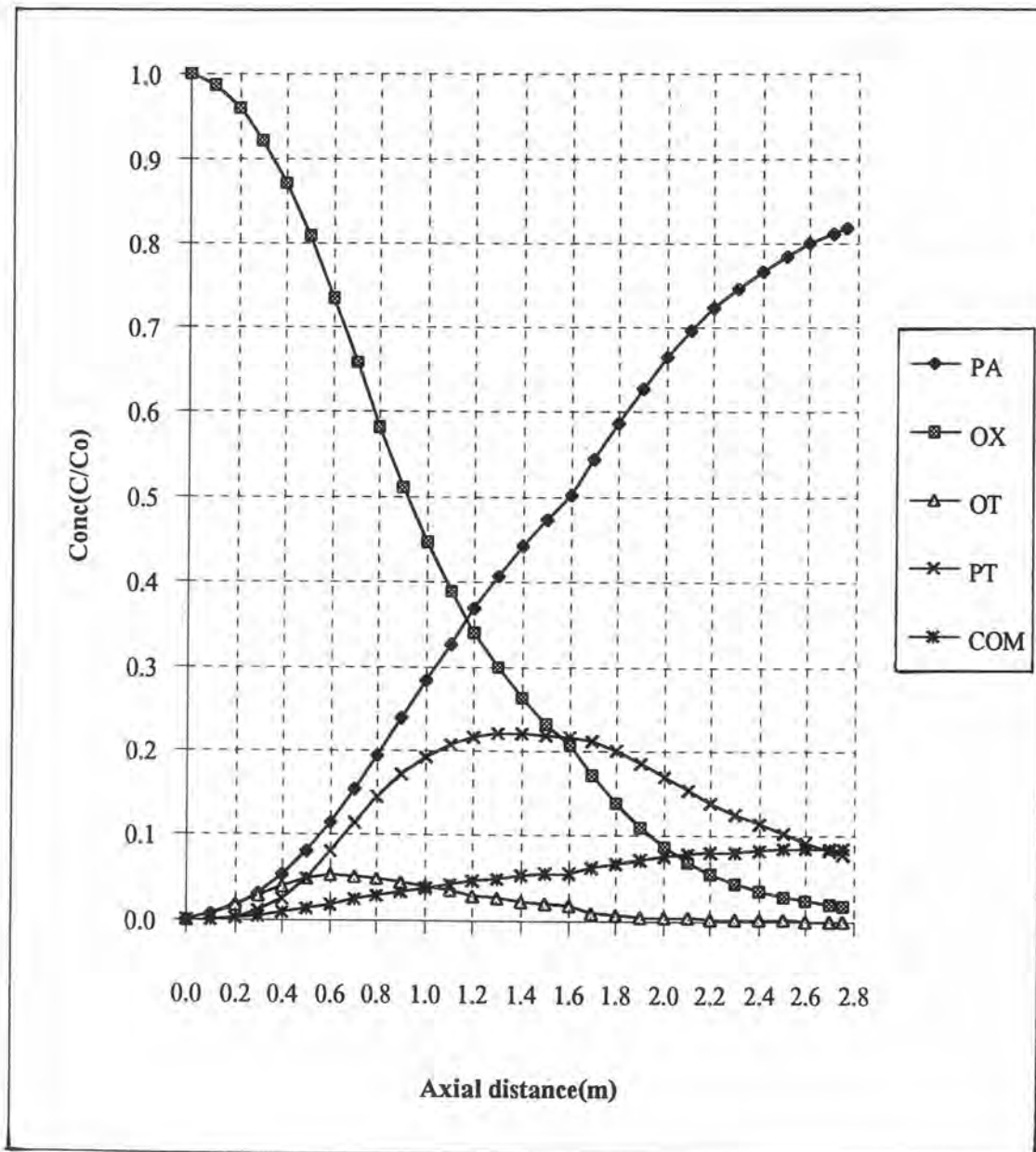
$$Bi_w = 0.9, Pe_{nr} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$



รูปที่ 5.10 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 64 g/Nm<sup>3</sup>

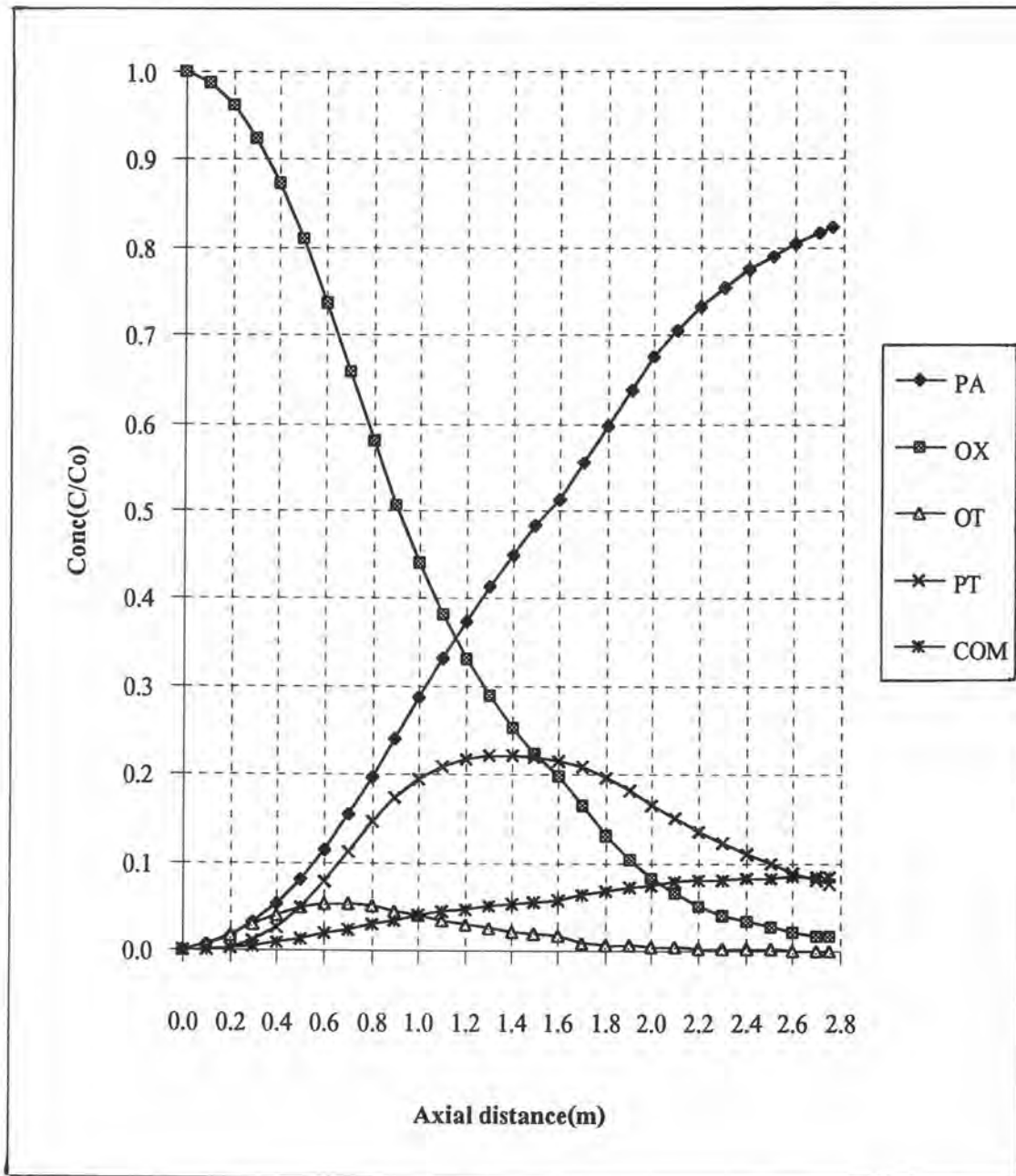
$$Bi_w = 0.9, Pe_{hr} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$





รูปที่ 5.11 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene 60 g/Nm<sup>3</sup>

$$Bi_w = 0.9, Pe_{tr} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$



รูปที่ 5.12 โพรไฟล์ของความเข้มข้นในแนวแกนที่ความเข้มข้น o-xylene  $64 \text{ g/Nm}^3$

$$Bi_w = 0.9, Pe_{pr} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$

แต่ความลึกของชั้นเบด 1.6 ม. ถึง 2.0 ม. ความเข้มข้นของ o-xylene จะลดลงอย่างรวดเร็วอีกครั้งหนึ่งซึ่งเป็นช่วงที่มีอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สอง จากนั้นความเข้มข้นของ o-xylene จะค่อยลดลงอีกครั้งหนึ่งจนผ่านไปยังทางออกของเครื่องปฏิกรณ์ ส่วนความเข้มข้นของ phthalic anhydride ซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์หลักที่ต้องการนั้นจะเพิ่มขึ้นในทิศทางที่ตรงกันข้ามกับการลดลงของความเข้มข้นของ o-xylene สำหรับความเข้มข้นของ COM จะค่อยเพิ่มถึงจุดสูงสุดที่ความลึก 2.2 ม. จากนั้นความเข้มข้นจะคงที่ถึงทางออกเครื่องปฏิกรณ์ ส่วนความเข้มข้นของ o-tolualdehyde และ phthalide จะเพิ่มขึ้นจนถึงจุดสูงสุดที่ความลึก 0.6 ม. และ 1.2 ม. ตามลำดับ จากนั้นความเข้มข้นจะค่อยลดลงต่ำสุดและก็คงที่ที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์ สาเหตุที่เป็นเช่นนี้เพราะว่าทั้ง o-tolualdehyde และ phthalide เป็นผลิตภัณฑ์ขั้นกลางซึ่งสามารถเกิดปฏิกิริยาเป็นผลิตภัณฑ์อื่นได้

จากผลที่ได้จากการทำนายความเข้มข้นในแนวแกนของเครื่องปฏิกรณ์ พบว่าอัตราส่วนโดยน้ำหนักของ phthalic anhydride ที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์ต่อ o-xylene ที่ป้อนเข้า นั้นมีค่าประมาณ 1.15 ซึ่งเมื่อเทียบกับค่าที่ได้จากการวัดขณะปฏิบัติการจริงนั้นจะมีค่าประมาณ 1.13 ซึ่งเป็นค่าที่ค่อนข้างใกล้เคียงกัน

### 5.3 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวรัศมีที่ได้จากการจำลอง

ผลการทำนายโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวรัศมีที่ตำแหน่งซึ่งเกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดทั้งสองชั้นเบด คือที่ความลึก 0.9 ม. ในชั้นเบดแรก และที่ความลึก 1.8 ม. ในชั้นเบดที่สอง ซึ่งมีความเข้มข้นของ o-xylene 65 g/Nm<sup>3</sup> โดยการใช้ตัวแปรที่ได้ทำการปรับให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้นั้นแสดงในรูปที่ 5.13 ซึ่งแสดงให้เห็นว่าอุณหภูมิในแนวรัศมีที่มีความลึกของชั้นเบดเดียวกันนั้น อุณหภูมิจะค่อยลดลงจากแกนกลางของท่อไปยังผนังท่อของเครื่องปฏิกรณ์ โดยที่ลักษณะการลดลงของอุณหภูมิในแนวรัศมีนั้นจะเป็นรูปทรงพาราโบลา

### 5.4 สรุปผล

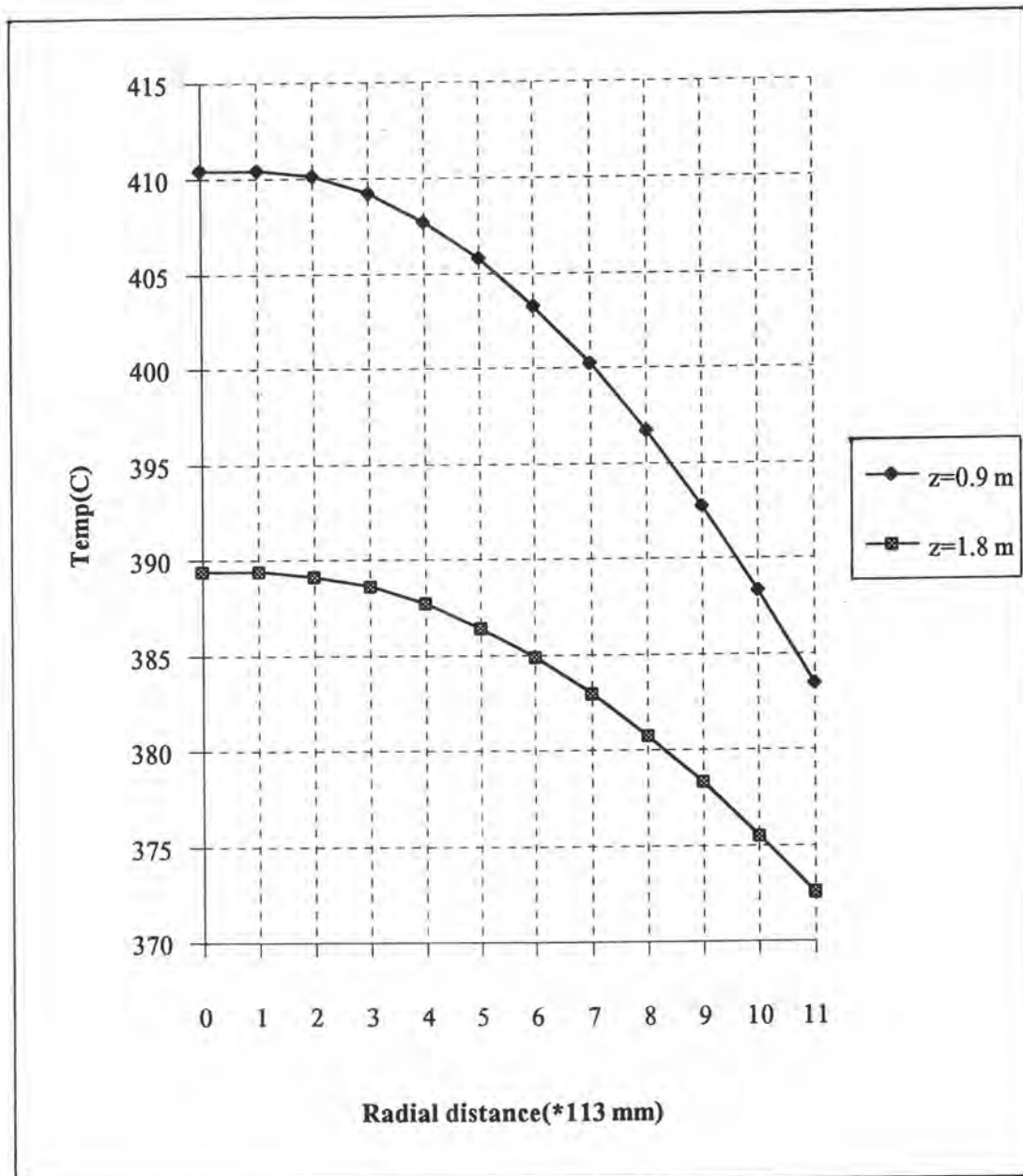
ในบทนี้เป็นการเสนอผลการจำลองแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ในระหว่างการปรับค่าตัวแปรที่เหมาะสมและเมื่อปรับค่าที่เหมาะสมเรียบร้อยแล้ว โดยที่มีการคิดรวมสมการค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยารวมในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ นอกจากนี้แล้วยังใช้ผลการจำลองที่ได้จากการทำนายแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ที่ได้ปรับตัวแปรให้เหมาะสมที่สภาวะปฏิบัติการอื่นเปรียบเทียบผลที่ได้จากการปฏิบัติการจริงที่สภาวะปฏิบัติการเดียวกัน ซึ่งผลที่ได้ยังคงมีความใกล้เคียงกัน

สำหรับค่าตัวแปรที่มีการปรับเพื่อให้มีความเหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้  
นั้นมีดังต่อไปนี้

$Bi_w$	0.9
$Pe_{br}$	8.0
$\ln(k_{1,0})$	-2.7

จากผลการจำลองที่ได้จากแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งมีการรวมกลไกการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาโดยที่มีการปรับตัวแปรให้เหมาะสมกับเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้แล้วนั้น แสดงให้เห็นว่ากลไกการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยามีบทบาทสำคัญในการทำนายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ ดังนั้นแบบจำลองที่มีความถูกต้องในการทำนายนั้นสามารถทำได้โดยรวมการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้โดยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคงเข้าไปในสมการค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา สำหรับในงานวิจัยนี้ ค่า  $a_m$  ซึ่งเป็นค่าที่สมมุติขึ้นให้เป็นค่าชดเชยการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้โดยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคงได้ถูกประมาณให้มีค่าต่างกันตามลำดับขั้นตอนการเกิดปฏิกิริยา และตามลักษณะการบรรจุตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้ มีการบรรจุตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสองชั้นเขตตามค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา โดยที่การประมาณค่า  $a_m$  นั้นเป็นการชดเชยข้อบกพร่องที่ไม่สามารถศึกษา ปรากฏการณ์การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้ โดยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคง เนื่องจากกระบวนการเกิดสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคงนั้นเกิดขึ้นช้ามากต้องใช้เวลาในการทดลองหนึ่งครั้ง ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงไม่สามารถทำการทดลองได้ และพบว่าค่า  $a_m$  ที่สมมุติขึ้นนั้นสามารถใช้ในแบบจำลองได้ดีตลอดในช่วงการทำวิจัยนี้

ผลการจำลองแสดงให้เห็นว่า เมื่อสมการค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยารวมเข้าไปในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ทำให้การทำนายผลของอุณหภูมิและตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจตุมีความใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการปฏิบัติการจริง โดยแบบจำลองสามารถทำนายตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจตุได้ตรงกับที่ได้จากการปฏิบัติการจริง ในขณะที่อุณหภูมิที่จุดร้อนจตุที่ได้จากการทำนายจะมีค่าสูงกว่าที่ได้จากการปฏิบัติการจริงประมาณ 1-3 °C



รูปที่ 5.13 โพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวรัศมีที่ความเข้มข้น  $65 \text{ g/Nm}^3$

$$Bi_w = 0.9, Pe_{br} = 8.0, \ln(k_{1,0}) = -2.7$$