

การจำลองแบบการใส่ด้วยผลิตภัณฑ์ที่ถูกดูดซับได้ดีในเครื่องปฏิกรณ์แบบความดันสลับ

นาย พงษ์กิตติ์ ลักษมีพิเชษฐ์



สถาบันวิทยบริการ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2541

ISBN 974-331-540-3

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

๕ 186๘๙6๐๘

**SIMULATION OF PURGE WITH STRONG-ADSORPTIVE PRODUCT IN PRESSURE
SWING REACTOR**



Mr Pongkit Luksamepicheat

สถาบันวิทยบริการ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

**A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Chemical Engineering**

Department of Chemical Engineering

Graduate School

Chulalongkorn University

Academic Year 1998

ISBN 974-331-540-3

หัวข้อวิทยานิพนธ์

การจำลองแบบการไล่ด้วยผลิตภัณฑ์ที่ถูกดูดซับได้ดีใน
เครื่องปฏิกรณ์แบบความดันสลับ

โดย

นายพงษ์กิตติ์ ลักษณะมีพิเชษฐ์

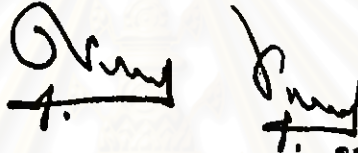
ภาควิชา

วิศวกรรมเคมี

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์

อาจารย์ ดร. เฉชา ฉัตรศิริเวช

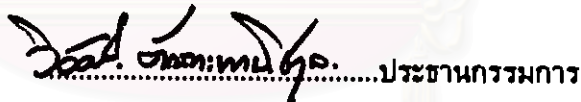
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็น
ส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาโทบัณฑิต



.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(ศาสตราจารย์ นายแพทย์ สุภวัฒน์ ชูติวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์



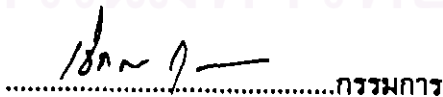
.....ประธานกรรมการ

(ศาสตราจารย์ ดร. วิวัฒน์ ตัณฑะพานิชกุล)



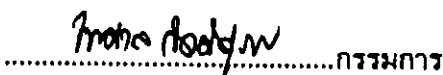
.....อาจารย์ที่ปรึกษา

(อาจารย์ ดร. เฉชา ฉัตรศิริเวช)



.....กรรมการ

(อาจารย์ ดร. เจดศักดิ์ ไชยจุนา)



.....กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ไพศาล กิตติสุภกร)

พงษ์ศักดิ์ ถักมณีพิเชษฐ : การจำลองแบบการไล่ด้วยผลิตภัณฑ์ที่ถูกดูดซับได้ดีในเครื่องปฏิกรณ์แบบ
ความดันสลับ (SIMULATION OF PURGE WITH STRONG-ADSORPTIVE PRODUCT IN PRESSURE
SWING REACTOR) อ. ที่ปรึกษา : ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช, 141 หน้า, ISBN 974-331-540-3.

แบบจำลองคณิตศาสตร์ สำหรับระบบการเกิดปฏิกิริยาเคมีของคาร์บอนมอนอกไซด์กับน้ำ เป็นคาร์บอน-ไดออกไซด์กับไฮโดรเจน ควบคู่กับการแยกคาร์บอนไดออกไซด์ด้วยการดูดซับแบบความดันสลับ สร้างขึ้นด้วยสมมติฐาน อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีและอัตราการดูดซับมีค่าจำกัด ลักษณะการดำเนินการแบบความดันสลับลักษณะต่างๆ คัดแปลงจากลักษณะการดำเนินการของ Skarstrom โดยเพิ่มขึ้นคอนการไล่แบบไหลตามด้วยผลิตภัณฑ์คาร์บอนไดออกไซด์ ซึ่งถูกดูดซับได้ดี และ/หรือ ลดขั้นคอนการไล่แบบสวนทางด้วยผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน ซึ่งไม่ถูกดูดซับ ณ อุณหภูมิ 400 องศาเซลเซียส ปฏิกิริยาเคมีภายใต้สภาวะดังกล่าวเกิดขึ้นได้มากกว่าข้อจำกัดของสมดุลเคมี และระบบนี้สามารถแยกผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจนเข้มข้น และคาร์บอนไดออกไซด์เข้มข้นได้ ด้วยขั้นคอนการไล่แบบสวนทางด้วยผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน และการไล่แบบไหลตามด้วยผลิตภัณฑ์คาร์บอนไดออกไซด์ ตามลำดับ แต่กระบวนการให้อัตราการผลิตต่ำกว่าเครื่องปฏิกรณ์เคมีปกติ แม้ว่าอัตราการผลิตจะเพิ่มสูงขึ้น เมื่อลดคาบเวลาของรอบดำเนินการ สัดส่วนของตัวดูดซับในเครื่องปฏิกรณ์มีผลต่อการเพิ่มสมรรถนะของระบบ ทั้งในลักษณะของการเพิ่มสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาเคมี และเพิ่มความเข้มข้นของผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน และคาร์บอนไดออกไซด์

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา วิศวกรรมเคมี
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2541

ลายมือชื่อนิสิต *พงษ์ศักดิ์ ถักมณีพิเชษฐ*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา *ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช*
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาพร้อม *ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช*

3971095021 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD:

PRESSURE SWING REACTOR / PRESSURE SWING ADSORPTION / ADSORPTIVE REACTOR / STRONG-ADSORPTIVE PURGE / SIMULATION / ORTHOGONAL COLLOCATION ON FINITE ELEMENTS

PONGKIT LUKSAMEPICHEAT : SIMULATION OF PURGE WITH STRONG-ADSORPTIVE PRODUCT IN PRESSURE SWING REACTOR. THESIS ADVISOR : DEACHA CHATSIRIWECH, Ph.D. 141 pp. ISBN 974-331-540-3.

Mathematical model for simultaneous reaction of carbon monoxide with water, to produce carbon dioxide and hydrogen, and carbon dioxide adsorption with pressure swing operation was formulated with the assumption of finite reaction and adsorption rate. Both reaction and separation performance were investigated with various pressure swing operations modified from Skarstrom cycle by addition of cocurrent purge with carbon dioxide, which was not adsorbed. At 400°C, the reaction was enhanced over the equilibrium limit. In addition, high concentration of hydrogen and carbon dioxide were obtained by countercurrent purge with the former and cocurrent purge with the latter, respectively. However, the production rate was lower than that of the conventional plug flow reactor, although the rate could be increased by reduction of the cycle period. The amount fraction of adsorbent in the system improved both reaction performance and purities of hydrogen and carbon dioxide.

สถาบันวิทยบริการ

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา.....วิศวกรรมเคมี.....

สาขาวิชา.....วิศวกรรมเคมี.....

ปีการศึกษา..... 2541.....

ลายมือชื่อนิสิต..... *Pongkit Luksamepicheat*.....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา..... *Decha Chatsiriwech*.....

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม.....



กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบคุณอาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ ดร. เดชา ฉัตรศิริเวช ผู้มีส่วนสำคัญในการริเริ่มงานวิจัย รวมทั้งการช่วยเหลือ และการให้คำแนะนำตลอดงานวิจัยนี้

ขอขอบคุณประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ศาสตราจารย์ ดร.วิวัฒน์ ดัดทะพานิชกุล และกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ ดร. เจตศักดิ์ ไชยคุนา และ ดร. ไพศาล กิตติศุภกร สำหรับความช่วยเหลือ ตั้งแต่การตรวจสอบโครงร่างวิทยานิพนธ์ ตลอดจนข้อเสนอแนะต่างๆ ในการศึกษาวิจัย

ขอขอบคุณ Professor Shigeo Goto สำหรับข้อมูลจากงานวิจัยของท่าน และขอขอบคุณเพื่อนๆ โดยเฉพาะสุชาดา บุตรนาถ ยุทธนา กุลินทรประเสริฐ และยุทธนา วนพฤษา ที่ช่วยเหลือในการหาข้อมูล และบทความวิจัยที่จำเป็นตลอดการวิจัยนี้

ขอขอบคุณบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย สำหรับเงินสนับสนุนบางส่วนในงานวิจัย และขอขอบคุณเจ้าหน้าที่ในภาควิชาวิศวกรรมเคมี สำหรับการอำนวยความสะดวกตลอดการศึกษารวมทั้งความช่วยเหลือจากพี่ๆ ในห้องวิจัย process systems engineering และห้องวิจัย separation technology

ท้ายสุดนี้ ขอขอบคุณครอบครัว และเพื่อนๆ ทุกคนที่เป็นกำลังใจในระหว่างการศึกษาจนสำเร็จได้ด้วยดี

สารบัญ

บทคัดย่อ	ง
บทคัดย่อ (ภาษาอังกฤษ)	จ
กิตติกรรมประกาศ	ค
สารบัญ	ข
สารบัญรูป	ญ
สารบัญตาราง	ด
สัญลักษณ์และอักษรย่อ	ถ
1 .บทนำ	1
2 เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบความดันสลับ	4
2.1 การแยกของผสมด้วยการดูดซับ	4
2.1.1 กระบวนการแบบพาราเมตริกปั๊ม	5
2.1.2 กระบวนการเบดเคลื่อนที่และเบดเคลื่อนที่จำลอง	6
2.1.3 กระบวนการดูดซับแบบความดันสลับ	8
2.2 เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบมีการแยกควบคู่	13
2.2.1 เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบแผ่นเยื่อ	14
2.2.2 เครื่องปฏิกรณ์เคมีแบบมีการดูดซับควบคู่	14

3	การจำลองระบบปฏิกิริยาเคมี	
	แบบความดันสลับ	21
3.1	การสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์	21
3.2	การหาคำตอบเชิงตัวเลข	26
3.2.1	วิธีการคอลโลเคชันแบบอริโธกอนัล	26
3.2.2	วิธีการคอลโลเคชันแบบอริโธกอนัลในไฟไนต์อีลีเมนต์	29
3.3	การหาคำตอบเชิงตัวเลขของแบบจำลองปฏิกิริยาเคมีควบคู่ กับการดูดซับแบบความดันสลับ	31
3.4	การตรวจสอบคำตอบจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์	33
4	ผลของการไล่ด้วย	
	องค์ประกอบดูดซับได้ดี	42
4.1	ระบบปฏิกิริยาเคมีแบบความดันสลับ	42
4.1.1	ปฏิกิริยาเคมี	42
4.1.2	สถานะดำเนินการแบบความดันสลับ	43
4.1.3	เกณฑ์สำหรับพิจารณาเปรียบเทียบ	45
4.2	การใช้ขั้นตอนการไล่แบบไหลตามกับขั้นตอนแบบ Skarstrom	47
4.2.1	สมรรถนะในลักษณะของการเกิดปฏิกิริยา	50
4.2.2	สมรรถนะในลักษณะของการแยกสาร	52
4.2.3	สมรรถนะในลักษณะของอัตราการผลิต	54
4.3	การใช้ขั้นตอนการไล่แบบไหลตามเมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน	55
4.3.1	ผลของคาบของการดำเนินการ	56
4.3.2	ผลของอัตราการไหล	58
4.4	การใช้ขั้นตอนการไล่แบบไหลตามในเครื่องปฏิกรณ์เคมี	
	แบบความดันสลับคาบสั้น	61
4.4.1	ผลของคาบของการดำเนินการ	61

4.4.2	ผลของอัตราการใช้ไฟ	64
4.4.3	ผลของขนาดของปริมาตรปลา	66
4.5	ผลของเวลาในขั้นตอนต่างๆ ต่อสมรรถนะของกระบวนการ	67
4.5.1	ขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน	67
4.5.2	ขั้นตอนการไล่แบบไหลตาม	69
4.5.3	ขั้นตอนการไล่แบบสวนทาง	70
4.6	การเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นภายในหอบบรรจุที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ	72
4.6.1	รอบดำเนินการที่มีการไล่ทั้งสองแบบ	72
4.6.2	รอบดำเนินการที่มีเพียงการไล่แบบสวนทาง	78
4.6.3	รอบดำเนินการที่มีเพียงการไล่แบบไหลตาม	78
4.6.4	รอบดำเนินการที่ไม่มีขั้นตอนการไล่	78
4.6.5	รอบดำเนินการที่ไม่มีขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน	79
4.7	ข้อสรุป	79
5	ผลของตัวแปรและขั้นตอนอื่นๆ	82
5.1	ผลของความดันสูงและความดันต่ำ	83
5.2	ผลของความสามารถในการทำปฏิกิริยาและการดูดซับของหอบบรรจุ	86
5.2.1	ผลของความสามารถในการทำปฏิกิริยาของหอบบรรจุ	86
5.2.2	ผลของความสามารถในการดูดซับของหอบบรรจุ	89
5.3	สมรรถนะเมื่อมีการป้อนไอน้ำมากเกินไป	90
5.4	สมรรถนะเมื่อมีตัวถูกดูดซับมากกว่าหนึ่งองค์ประกอบ	93
5.5	ผลของขั้นตอนการลดความดันแบบไหลตาม	94
5.6	ผลของการเพิ่มความดันแบบสวนทางและการแยกผลิตภัณฑ์ต้นหอบบรรจุ	97

5.7	ข้อสรุป	103
6	สรุปและข้อเสนอแนะ	105
	รายการอ้างอิง	111
ก	รูปแสดงการเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ	119
ก.1	รอบดำเนินการที่ลดขั้นตอนการไล่แบบไหลตาม	120
ก.2	รอบดำเนินการที่ลดขั้นตอนการไล่แบบสวนทาง	124
ก.3	รอบดำเนินการที่ไม่มีการไล่ทั้งสองแบบ	128
ก.4	รอบดำเนินการที่ลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน	131
	ก.4.1 เมื่อไม่มีการไล่แบบไหลตาม	131
	ก.4.2 เมื่อมีการไล่แบบไหลตาม	133
ก.5	รอบดำเนินการแบบคาบสั้น	136
	ก.5.1 เมื่อไม่มีการไล่แบบไหลตาม	136
	ก.5.2 เมื่อมีการไล่แบบไหลตาม	138
	ประวัติผู้เขียน	141

สารบัญรูป

2.1	กระบวนการดูดซับแบบพาราเมตริกปั๊ม (1) การควบคุมอุณหภูมิที่ของไหลเข้า-ออก หอดูดซับ (2) การควบคุมอุณหภูมิที่หอดูดซับโดยตรง	5
2.2	ลักษณะดำเนินการแบบเบดเคลื่อนที่ของ Sorbex (1) เบดเคลื่อนที่จริง (2) เบด เคลื่อนที่จำลอง	7
2.3	กระบวนการดูดซับแบบความดันสลับของ Skarstrom (1960)	9
2.4	กระบวนการดูดซับแบบความดันสลับคาส์สัน	12
2.5	หอบรรจุแบบมีปริมาตรเปล่าปลายหอบรรจุ	12
3.1	ภาคตัดของหอบรรจุ	23
3.2	ตำแหน่งของจุดคอลโลเคชันภายใน (o) และจุดขอบของช่วงย่อย(o)	29
3.3	เปรียบเทียบคำตอบการจำลองแบบของโปรแกรมกับวิธีการ MOC (1) y_A (2) y_B และ (3) y_C	35
3.4	ค่า f_5 ตามสมการ 3.37	39
3.5	เปรียบเทียบจากการจำลองแบบและจากการทดลองโดย Vaporclyan (1987) (1) ผลิต กัณฑ์ปลายหอบรรจุ (2) ผลิตกัณฑ์ต้นหอบรรจุ	40
4.1	ความสัมพันธ์ระหว่าง $\frac{W_c}{F_0}$ และ X_{CO}	47
4.2	ขั้นตอนดำเนินการของกระบวนการที่ต้องการเปรียบเทียบ 4 กระบวนการ	48
4.3	ขั้นตอนดำเนินการเมื่อเพิ่มการไล่แบบไหลตามในรอบดำเนินการแบบ Skarstrom	48

4.4 ผลของอัตราการใช้ของผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุต่อสมรรถนะในลักษณะของการเกิดปฏิกิริยา และสัดส่วนการใช้ผ่าน ในรอบดำเนินการแบบต่าง ๆ (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นในผลิตภัณฑ์ต้นหอบรรจุ (3) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นในผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุ (4) สัดส่วนการใช้ผ่าน 51

4.5 ผลของอัตราการใช้ของผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุต่อสมรรถนะในลักษณะของการแยกสาร ในรอบดำเนินการแบบต่าง ๆ (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์คาร์บอนไดออกไซด์ (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน (3) สัดส่วนของคาร์บอนไดออกไซด์ที่แยกได้ (4) สัดส่วนการแยกได้ของผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน 53

4.6 ผลของอัตราการใช้ของผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุต่ออัตราการผลิตสัมพัทธ์ ในรอบดำเนินการแบบต่าง ๆ 54

4.7 ผลของคาบของการดำเนินการต่อสมรรถนะต่างๆ และสัดส่วนการใช้ผ่าน เมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) สัดส่วนการใช้ผ่าน (5) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 57

4.8 ผลของอัตราการใช้ของผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุ ต่อสมรรถนะต่างๆ และสัดส่วนการใช้ผ่าน เมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นที่เหลือ (3) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (4) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (5) สัดส่วนการใช้ผ่าน (6) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 60

4.9 ผลของคาบของการดำเนินการต่อสมรรถนะต่างๆ และสัดส่วนการใช้ผ่าน ในกระบวนการแบบความดันสลับคาบสั้น (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) สัดส่วนการใช้ผ่าน (5) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 63

- 4.10 ผลของอัตราการไหลของผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุ ต่อสมรรถนะต่างๆ และสัดส่วนการไหลผ่าน ในกระบวนการแบบความดันสลับคาบสั้น (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) สัดส่วนการไหลผ่าน (5) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 65
- 4.11 ผลของเวลาในขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน ต่อสมรรถนะต่างๆ เมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 68
- 4.12 ผลของเวลาในขั้นตอนการไล่แบบไหลตาม ต่อสมรรถนะต่างๆ เมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 69
- 4.13 ผลของเวลาในขั้นตอนการไล่แบบสวนทาง ต่อสมรรถนะต่างๆ เมื่อลดขั้นตอนการเพิ่มและลดความดัน (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (3) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้ (4) อัตราการผลิตสัมพัทธ์ 71
- 4.14 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการเพิ่มความดันที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 73
- 4.15 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการผลิตที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 74
- 4.16 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการไล่แบบไหลตามที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 75
- 4.17 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการลดความดันที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 76

4.18 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการใส่แบบสวนทางที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	77
5.1 ผลของผลต่างของความดันสูงและความดันต่ำ ต่อสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาเคมี	83
5.2 ผลของผลต่างของความดันสูงและความดันต่ำ ต่อสมรรถนะต่างๆ และสัดส่วนการไหลผ่าน (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์คาร์บอนไดออกไซด์ (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน (3) สัดส่วนการไหลผ่าน (4) อัตราการผลิตสัมพัทธ์	84
5.3 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยาในวัสดุบรรจุ ต่อสมรรถนะในลักษณะการเกิดปฏิกิริยา (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นที่เหลือ	87
5.4 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยาในวัสดุบรรจุ ต่อสมรรถนะในลักษณะการแยกสาร (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (2) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้	87
5.5 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวเร่งปฏิกิริยาในวัสดุบรรจุต่ออัตราการผลิตสัมพัทธ์	88
5.6 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวตัวดูดซับในวัสดุบรรจุ ต่อสมรรถนะในลักษณะการเกิดปฏิกิริยา (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นที่เหลือ	89
5.7 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวดูดซับในวัสดุบรรจุ ต่อสมรรถนะในลักษณะการแยกสาร (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (2) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้	89
5.8 ผลของสัดส่วนโดยน้ำหนักของตัวดูดซับต่ออัตราการผลิตสัมพัทธ์	90
5.9 ผลของสัดส่วนโมลของไอน้ำในสายป้อน ต่อสมรรถนะในลักษณะการเกิดปฏิกิริยา (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา และสัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาที่สมดุล (2) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาสัมพัทธ์	91
5.10 ผลของสัดส่วนโมลของไอน้ำในสายป้อน ต่อสมรรถนะในลักษณะการแยกสาร (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์คาร์บอนไดออกไซด์ (2) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน (3) สัดส่วนของคาร์บอนไดออกไซด์ที่แยกได้ (4) สัดส่วนของไฮโดรเจนที่แยกได้	92
5.11 ผลของเวลาในการลดความดันแบบไหลตาม ต่อสมรรถนะในลักษณะการเกิดปฏิกิริยา (1) สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยา (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้นที่เหลือ	95

5.12	ผลของเวลาของขั้นตอนการลดความดันแบบไหลตามต่อสัดส่วนการไหลผ่าน	95
5.13	ผลของเวลาในการลดความดันแบบไหลตาม ต่อสมรรถนะในลักษณะการแยกสาร (1) สัดส่วนโมลของผลิตภัณฑ์ (2) สัดส่วนของผลิตภัณฑ์ที่แยกได้	96
5.14	ผลของเวลาของขั้นตอนการลดความดันแบบไหลตามต่ออัตราการผลิตสัมพัทธ์	96
5.15	ขั้นตอนดำเนินการเมื่อมีการเพิ่มความดันแบบสวนทาง	98
5.16	ขั้นตอนดำเนินการเมื่อมีการแยกผลิตภัณฑ์ต้นหอบรรจุเป็นสองสาย	99
ก.1	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการเพิ่มความดันที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนได ออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	120
ก.2	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการผลิตที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนได ออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	121
ก.3	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนลดความดันที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนได ออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	122
ก.4	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการไล่แบบสวนทางที่สภาวะคงตัวแบบเป็น คาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของ คาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	123
ก.5	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการเพิ่มความดันที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนได ออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	124
ก.6	การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการผลิตที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนได ออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน	125

- ก.15 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการไล่แบบไหลตามที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 134
- ก.16 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการไล่แบบสวนทางที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 135
- ก.17 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการป้อนที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 136
- ก.18 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการคายการดูดซับที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 137
- ก.19 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการป้อนที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 138
- ก.20 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการไล่แบบไหลตามที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 139
- ก.21 การเปลี่ยนแปลงภายในหอบรรจุในขั้นตอนการคายการดูดซับที่สภาวะคงตัวแบบเป็นคาบ (1) ความดันเชิงไร้มิติ (2) สัดส่วนโมลของสารตั้งต้น (3) สัดส่วนโมลของคาร์บอนไดออกไซด์ (4) สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน 140

สารบัญตาราง

2.1	เปรียบเทียบสมรรถนะของกระบวนการความดันสลับแบบหลายหอดูดซับ และแบบคาบสั้น กับกระบวนการพื้นฐาน	13
3.1	ข้อมูลสำหรับการจำลองแบบเพื่อเปรียบเทียบกับคำตอบจากวิธีการ MOC	34
3.2	ข้อมูลสำหรับการจำลองแบบกระบวนการที่ทดลองโดย Vaporciyan (1987)	36
3.3	สถานะดำเนินการสำหรับการจำลองแบบกระบวนการที่ทดลองโดย Vaporciyan (1987)	37
4.1	ข้อมูลทางกายภาพของเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในการจำลองแบบ	44
4.2	ขั้นตอนดำเนินการเมื่อเพิ่มขั้นตอนการไล่แบบไหลตามในขั้นตอนแบบ Skarstrom	49
4.3	สถานะขอบเขตเมื่อเพิ่มขั้นตอนการไล่แบบไหลตามในขั้นตอนแบบ Skarstrom	49
4.4	ผลของขนาดของปริมาตรเปล่าปลายหอบรรจุต่อสมรรถนะของเครื่องปฏิกรณ์	66
5.1	เปรียบเทียบสมรรถนะในลักษณะต่างๆ เมื่อมีตัวถูกดูดซับมากกว่าหนึ่งองค์ประกอบ	93
5.2	เปรียบเทียบสมรรถนะในลักษณะต่างๆ ของเครื่องปฏิกรณ์เคมีเมื่อมีเพิ่มความดันแบบสวนทาง และการแยกผลิตภัณฑ์ต้นหอบรรจุเป็นสองสาย	101

สัญลักษณ์และอักษรย่อ

สัญลักษณ์

A	พื้นที่หน้าตัดของหอบรรจุ [m^2]
A	เมตริกซ์สำหรับการประมาณอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบไม่ต่อเนื่อง
B	เมตริกซ์สำหรับการประมาณอนุพันธ์อันดับสองแบบไม่ต่อเนื่อง
c	ความเข้มข้นในวัฏภาคก๊าซ [$kmol/m^3$]
d_p	เส้นผ่านศูนย์กลางของวัสดุบรรจุ [m]
D_{az}	สัมประสิทธิ์การกระจายตามแนวแกน [m^2/s]
D_{MO}	สัมประสิทธิ์การแพร่ที่ความดันอ้างอิง (m^2/s)
F_O	อัตราการไหลเชิงโมลของสายป้อน [$kmol/s$]
h	$1/NE$
J_k	สัมประสิทธิ์ของพจน์ความดันลดในการไหลแบบปั่นป่วนในหอบรรจุ [$N-s^2/m^5$]
J_v	สัมประสิทธิ์ของพจน์ความดันลดในการไหลแบบเป็นชั้นในหอบรรจุ [$N-s/m^4$]
k	สัมประสิทธิ์การถ่ายเทมวลระหว่างวัฏภาคตามการประมาณแรงขับแบบเชิงเส้น [s^{-1}]
l_j	ค่าคงที่สมดุลการดูดซับ Langmuir ขององค์ประกอบ "j" [$m^3/kmol$]
$l_i(x_A)$	สัมประสิทธิ์ของพจน์ที่ "i" สำหรับการประมาณค่าที่ตำแหน่ง x_A
L	ความยาวหลอดดูดซับ [m]
MW_j	มวลโมเลกุลขององค์ประกอบ "j"
n_j	ความเข้มข้นในวัฏภาคการดูดซับขององค์ประกอบ "j" [$kmol/kg$ -adsorbent]
n_j^*	ความเข้มข้นสมดุลในวัฏภาคการดูดซับขององค์ประกอบ "j" [$kmol/kg$ -adsorbent]
n_j^*	ปริมาณการดูดซับสูงสุด ตามสมดุลการดูดซับ Langmuir ขององค์ประกอบ "j" [$m^3/kmol$]
N_j	$\rho a n_j / c_o$ [s^{-1}]
NC	จำนวนองค์ประกอบรวมของระบบ
NDV	จำนวนตัวแปรตามรวมของชุดสมการแบบจำลอง
NE	จำนวนช่วงย่อยในการหาคำตอบ
NP	จำนวนจุดคอลโลเคชันในแต่ละช่วงย่อย
NT	จำนวนจุดคอลโลเคชันรวม
P	ความดัน [Pa]
$P_N(x)$	พหุนามออร์โธโกนัลอันดับที่ N
Q	$u\phi/L$ [s^{-1}]
$(-r_j)$	อัตราการเกิดปฏิกิริยาขององค์ประกอบ "j" [$kmol/kg$ -catalyst.s]
R	ค่าคงที่ของก๊าซ [8.3143 kPa-m ³ /kmol-K]
$(-R_j)$	$\rho c(-r_j)/c_o$ [s^{-1}]
s_i	ตำแหน่งในโดเมนของช่วงย่อย "i"
S_i	ตำแหน่งขอบช่วงย่อยที่ "i"

t	เวลา [s]
T	อุณหภูมิ [K]
u	ความเร็วเฉลี่ยตามแนวแกน [m/s]
V_R	ขนาดของปริมาตรเปล่า [m ³]
W_C	น้ำหนักบรรจุของตัวเร่งปฏิกิริยา [kg]
X_j	สัดส่วนการเกิดปฏิกิริยาของสารตั้งต้น "j"
y_j	สัดส่วนโมลขององค์ประกอบ "j"
$y(x_A)$	ตัวแปรตามในอินเตอร์โพลชันที่ตำแหน่ง x_A
z	ระยะทางตามแนวแกน [m]
α	พารามิเตอร์สำหรับออร์โธกอนัลโพลีโนเมียล
α	สัมประสิทธิ์ของการดูดซับตามสมดุลการดูดซับแบบเชิงเส้น [kmol/kg-Pa]
β	พารามิเตอร์สำหรับออร์โธกอนัลโพลีโนเมียล
ϵ	พารามิเตอร์สำหรับประมาณการเปลี่ยนแปลงเป็นขั้นแบบต่อเนื่อง (สมการ 3.37)
ϵ_b	สัดส่วนที่ว่างของหอบรรจุ
ϵ_t	สัดส่วนที่ว่างรวมของหอบรรจุ
λ	ความยาวเชิงไร้มิติ
λ_p	particle sphericity
μ_g	ความหนืดของก๊าซ [kg/m-s]
ϕ	ความดันเชิงไร้มิติ
ρ	ความหนาแน่นของของไหล [kg/m ³]
ρ_a	น้ำหนักบรรจุของตัวดูดซับต่อปริมาตรหอบรรจุ [kg/m ³]
ρ_c	น้ำหนักบรรจุของตัวเร่งปฏิกิริยาต่อปริมาตรหอบรรจุ [kg/m ³]

ตัวห้อย

D	อัตราการผลิตผลิตภัณฑ์
eq	สมดุลเคมี
h	ที่ความดันสูง
j	องค์ประกอบ "j"
l	ที่ความดันต่ำ
o	ที่สภาวะอ้างอิง
P	อัตราการผลิต

ตัวยก

f	สายป้อน
$p1$	ผลิตภัณฑ์ปลายหอบรรจุ
$p2$	ผลิตภัณฑ์ต่อหอบรรจุ

อักษรย่อ

BDF	Backward Differential Formular
CIS	Cell-In-Series
DASSL	Differential/Algebraic Equation Systems Solver
MOC	Method Of Characteristic
MOL	Method of Lines

OCFE	Orthogonal Collocation On Finite Elements
DOCFE	Double Orthogonal Collocation On Finite Elements
SERP	Sorption Enhanced Reaction Process
STP	Standard Temperature and Pressure



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย