บทที่3
การสำรวจเอกสารและแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่ง

แบบจำลองสำหรับเครื่องปฏิกรณ์นั้น จะมีประโยชน์ในการทำนายอัตราส่วนของผลิตภัณฑ์, โพรไฟล์ของการเปลี่ยนรูปและโพรไฟล์ของอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่ง สำหรับแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่งสามารถแบ่งออกได้เป็นสองกลุ่ม โดยพิจารณาแบ่งตามคุณสมบัติทางกายภาพภายในเครื่องปฏิกรณ์ คือแบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous และ heterogeneous โดยที่แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous จะพิจารณาเสมือนเฟสของแข็งและเฟสของไหลเป็นเฟสเดียวกัน โดยที่คุณสมบัติต่างๆที่ใช้ในแบบจำลองชนิดนี้จะแสดงในรูปของตัวแปรการนำพายังผล ในขณะที่แบบจำลองชนิด heterogeneous จะพิจารณาสมการอนุรักษ์มวลและความร้อนแยกกันระหว่างของแข็งและของไหล โดยจะเชื่อมทั้งสองเฟสเข้าด้วยกันผ่านทางการสมดุลมวลและความร้อนที่ผิวสัมผัสของของแข็งและของไหล ซึ่งในแต่ละกลุ่มของแบบจำลองยังแบ่งย่อยได้อีก ซึ่งจะขึ้นอยู่กับความซับซ้อนในการคิดพจน์ในสมการอนุรักษ์มวลและความร้อนดังแสดงในตารางที่ 3.1 [Froment และBischoff (1990)]

ตารางที่ 3.1 แสดงการจำแนก แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่ง

	Pseudo-homogeneous	Heterogeneous
One-dimensional	Plug flow	plug flow + interfacial gradients
	+axial dispersion	+ intraparticle gradients
Two-dimensional	+radial dispersion	+radial mixing

แบบจำลองชนิดต่างๆได้ถูกใช้ในการหาพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดเบดนิ่ง อย่างไรก็ตามความล้มเหลวในการทำนายพฤติกรรมก็มีการนำเสนอออกมาบ่อยๆ ส่วนสาเหตุที่เชื่อว่าเป็นเหตุให้เกิดความล้มเหลวคือความคิด ดังต่อไปนี้ (1) กลศาสตร์ของไหลและการนำพาความร้อนภายในของเบดนิ่ง และ (2) พฤติกรรมของตัวเร่งปฏิกิริยาในสภาวะการปฏิบัติการที่ต่างกัน สำหรับความล้มเหลวของแบบจำลองที่มาจากความยากในการจำลองปรากฏการณ์การนำพาของมวลและ

ความร้อนนั้นเป็นที่รับรู้กันทั่วไป แต่ความล้มเหลวที่มาจากความรู้ ซึ่งมีน้อยเกี่ยวกับพฤติรรมของตัวเร่งปฏิกิริยา ถูกคำนึงถึงเฉพาะในระบบของ ปฏิกิริยาและตัวเร่งปฏิกิริยา ถึงแม้ว่ามีงานวิจัยที่ได้ดำเนินการหาพฤติกรรมของตัวเร่งปฏิกิริยาภายใต้สภาวะของปฏิกิริยา แต่ปัญหาหลายอย่างยังคงอยู่ที่เป็นเช่นนี้เพราะว่าพฤติกรรมของตัวเร่งปฏิกิริยามีแนวโน้มไปสู่ความจำเพาะในระบบของส่วนประกอบตัวเร่งปฏิกิริยาและปฏิกิริยา ซึ่งทำให้การประมาณค่านอกช่วงของผลการทดลองในระบบหนึ่งไปยังอีกระบบอื่นที่คล้ายกันอาจจะไม่มีความเหมาะสม [Mongkhonsi (1994)]

กระบวนการที่มีผลกระทบต่อพฤติกรรมของตัวเร่งปฏิกิริยาก็คือการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา (deactivation) ของตัวเร่งปฏิกิริยา Butt และคณะ [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้นิยามว่า การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาคือกระบวนการทางเคมีหรือทางกายภาพใดๆ ที่ไปลดความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยา สำหรับการจำแนกกลไกการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยานั้นมีหลายเกณฑ์ให้พิจารณาด้วยกัน ยกตัวอย่างเช่น Hughes, Peterson, และ Bell [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้จำแนกกระบวนการการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยาชนิด heterogeneous ออกเป็น 3 กลุ่มด้วยกัน คือ ความเป็นพิษ (poisoning), การอุดตัน(fouling) , และ การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาโดยความร้อน (sintering) ส่วน Saterfield (1991) ได้จำแนกสาเหตุของการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยา ออกเป็น 4 กลุ่ม คือ ความเป็นพิษ,การอุดตัน, การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาโดยความร้อน และ การสูญเสียชนิดสารที่มีผลต่อความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัว-เร่งปฏิกิริยา และในบางครั้งกลไกการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาสามารถจำแนกต่อไปเป็นการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาแบบช้า/เร็ว หรือ แบบผันกลับได้/ผันกลับไม่ได้ [Mongkhonsi (1994)]

Butt และคณะ [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้นิยามการเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นโดยกลไกของความเป็นพิษไว้ดังต่อไปนี้

1) การดูดซับแบบผันกลับไม่ได้หรือการเกิดปฏิกิริยาของสารที่ปนเปื้อนมากับสารตั้งต้นบนผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา
2) การแข่งขันในการเกิดการดูดซับแบบผันกลับได้ของสารที่ปนเปื้อนมากับสารตั้งต้น
3) ความเป็นพิษ เป็นเหตุให้เกิดการเปลี่ยนโครงสร้างใหม่ของพื้นผิวตัวเร่งปฏิกิริยา
4) การปิดกั้นทางเคมีหรือทางกายภาพของโครงสร้างที่เป็นรูพรุนในตัวรองรับของตัวเร่งปฏิกิริยา

การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่เกิดจากกลไกของการอุดตันนั้น Peterson [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้ให้นิยามไว้ว่าเป็นปรากฏการณ์ที่นำไปสู่การเสื่อมความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งสารตั้งต้นของกระบวนการการอุดตันนั้นเป็นสารตั้งต้นหรือผลิตภัณฑ์ของปฏิกิริยาซึ่งไม่ใช่สิ่งที่เจือปนเข้ามากับสารตั้งต้น ตัวอย่างของปรากฏการณ์การอุดตันส่วนใหญ่ที่พบเป็นผลเนื่องมาจากการเกาะตัวของสารประเภทคาร์บอน หรือ ที่เรียกว่าโค้ก

Wanke และคณะ [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้นิยามการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาด้วยความร้อน คือ การที่ตัวที่ตัวเร่งปฏิกิริยาสูญเสียสารประกอบที่ช่วยในการเกิดปฏิกิริยาอันเนื่องมาจากการรวมตัวเป็นกลุ่มของโลหะ หรือ อีกนัยหนึ่งว่าการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาด้วยความร้อนเป็นผลมาจากการเพิ่มมากขึ้นของอนุภาคที่เป็นโลหะ

ในบทนี้ หัวข้อที่ 3.1 จะกล่าวถึงงานวิจัยที่เกี่ยวกับการพัฒนาแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ ส่วนในหัวข้อที่ 3.2 เป็นการเลือกแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์สำหรับใช้ในงานวิจัยนี้ และในหัวข้อที่ 3.3-3.4 จะกล่าวถึงแบบจำลองชนิด two–dimensional pseudo-homogeneous และแบบจำลองค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาตามลำดับ

3.1 การสำรวจเอกสาร

งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการสร้างแบบจำลองและการทดลองของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่ง มีดังนี้

Lopez-Izunza (1983) [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ได้ดำเนินการขยายการทดลองในสภาวะพลวัตในเครื่องปฏิกรณ์ชนิดที่จำลองขนาดจากอุตสาหกรรม แบบจำลอง 3 ชนิดได้ถูกพัฒนาขึ้นมา เพื่อใช้ในการบรรยายระบบของเครื่องปฏิกรณ์-ปฏิกิริยา ซึ่งแบบจำลองที่ถูกใช้ในการพัฒนามีดังต่อไปนี้

1) แบบจำลองชนิด heterogeneous

2) แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous

และ 3) โพรไฟล์ของความเร็วของ แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous

ความแตกต่างหลักระหว่างแบบจำลองชนิด heterogeneous และ แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous คือการกระจายความร้อนในแนวรัศมีของเฟสของแข็งที่ไม่ได้คิดรวมไว้ในสมการสมดุลความร้อนของเฟสของแข็ง

ผู้ทำการวิจัยได้รายงานว่า ด้วยแบบจำลองชนิดใดก็ตามจะมีความเกี่ยวพันเป็นอย่างมากกับการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาบางส่วน (การเปลี่ยนโพรไฟล์ของความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา) และมีสภาพไวของตัวแปร ในระหว่างที่มีพฤติกรรมแบบพลวัตของระบบ ในหลายกรณีแบบจำลองจะทำนายการตอบสนองได้เร็วกว่า หรือ มีสภาพไวน้อยลงกว่าที่สังเกตได้จากการทดลอง ซึ่งผู้ทำการวิจัยได้สรุปว่า นอกจากว่าได้มีการรวมเอากลไกรีดักชัน/ออกซิเดชันของตัวเร่งปฏิกิริยา เข้าไปในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ ไม่เช่นนั้นแบบจำลองจะล้มเหลวในการทำนาย 1) พฤติกรรมการสังเกตสภาวะพลวัตโดยเฉพาะในกรณีที่มีการเปลี่ยนแปลงเป็นอย่างมาก และ 2) สภาพไวของตัวแปรเป็นอย่างมาก ซึ่งแสดงให้เห็นโดยระบบการทดลองไปยังสภาวะการปฏิบัติการ

Paterson และ Carberry (1983) ได้เสนอแนะว่าในระบบที่มีการทำนายอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดของ เครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งที่มีการคายความร้อนอย่างสูง นั้นหมายความว่าแบบจำลองมีการประมาณอัตราการถ่ายความร้อนออกจากเบดต่ำเกินไป ซึ่งคณะผู้วิจัยได้ให้คำอธิบายไว้ดังต่อไปนี้

ก) ค่าการนำความร้อนในแนวรัศมียังผล (k_e) ลดลงเมื่อมีการเพิ่มขึ้นของความยาวเบด เนื่องจากปกติในการทดลองของการถ่ายเทความร้อนนั้นเกรเดียนท์ของอุณหภูมิในแนวแกนจะลดลงมาอยู่ในระดับเดียวกันเมื่อมีการเพิ่มความยาวเบด และจากการวิเคราะห์ เมื่อไม่มีการรวมพจน์ของการกระจายในแนวแกนเข้าไปในแบบจำลอง จะทำให้เกิดค่าผิดพลาดที่ต่ำไปของ k_e และค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนที่ผนัง (h_w)

ข) ชั้นเบดที่มีอัตราส่วนของเส้นผ่าศูนย์กลางท่อต่อเส้นผ่าศูนย์กลางของตัวเร่งปฏิกิริยาต่ำจะมีอัตราการถ่ายเทความร้อนในแนวรัศมีสูงกว่า ชั้นเบดที่มีอัตราส่วนดังกล่าวสูงกว่าที่มีการใช้ไน งานวิจัยหลายๆเรื่องเกี่ยวกับการถ่ายเทความร้อน

Wei และคณะ(1984) ได้เสนอวิธีการวิเคราะห์ จลนพลศาสตร์-อิสระ เพื่อใช้ในการประเมินดีกรีของความแตกต่างระหว่าง แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous และ แบบจำลองชนิด heterogeneous ของเครื่องปฏิกรณ์ 3 ชนิดด้วยกัน คือ ; ชนิดเบดนิ่ง, ชนิดไหลตาม, ชนิดไหลสวนทาง ซึ่งคณะวิจัยได้นิยาม ตัวแปรไร้มิติของการถ่ายเทความร้อน (θ) ไว้ว่า

$$\theta = \frac{h_p a_{hL}}{\rho_g u_g c_{p,g} + \rho_s u_s c_{p,s}} \qquad 3.1$$

ในกรณีของเครื่องชนิดไหลตามและชนิดเบดนิ่ง คณะผู้วิจัยพบว่าเมื่อค่าของ (θ) มากกว่า 50 อุณหภูมิเฉลี่ยระหว่าง เฟสของแข็งและของไหลจะต่างกันน้อยมาก ดังนั้นจึงสามารถประยุกต์แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous ได้ในการทำวิจัย

Melason และ Dixon (1985) ได้ชี้แนะถึงค่าการนำความร้อนยังผลและค่าคงที่การถ่ายเทความร้อนในชั้นเบดที่มีค่า d_t/d_p ต่ำ ในงานวิจัยนี้ได้ครอบคลุมช่วงกว้างของการใช้รูปทรงและขนาดของอนุภาค และค่าการนำความร้อน จากการพลอตกราฟ ความสัมพันธ์ระหว่าง ค่า d_t/d_p และค่า Biot number (Bi) แสดงให้เห็นว่า เมื่อ ค่า d_t/d_p ลดลง ค่าของ Bi ก็ลดตามลงด้วย แต่ค่าของ Bi เปลี่ยนแปลงดีขึ้นเมื่อ ค่าของ d_t/d_p น้อยกว่า 4 สำหรับท่อที่มีขนาดเส้นผ่าศูนย์กลาง 25 มม.และมีชั้นเบดที่มีค่า d_t/d_p ประมาณ 3 จะพบว่ามีค่าของ Bi_wประมาณ 1 ซึ่งเป็นความเห็นพ้องกันกับค่าที่รายงานโดย Lopez-Izunza (1983) [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] ซึ่งได้รายงานค่าของ Bi_w จะมีค่าอยู่ในช่วง 0.8-1.0 เป็นค่าที่เหมาะสมสำหรับใช้ในเครื่องปฏิกรณ์แบบนี้

Wellauer และคณะ (1986) ได้ทำการศึกษาสภาวะที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่ง สำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันบางส่วนของ n-butane ไปเป็น maleic anhydride โดยใช้แบบจำลองชนิด one-dimensional heterogeneous ที่มีการคิดการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยา สำหรับกลไกของการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยของตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้ในแบบจำลองนี้คือการระเหิดของฟอสฟอรัส ถึงแม้ว่าการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยาที่มาจากความเป็นพิษ ซึ่งเกิดขึ้นโดยการป้อนสารประกอบโลหะที่พอเหมาะเข้าไปพร้อมกับสารตั้งต้นของปฏิกิริยาและการเสื่อมความว่องในการเกิดปกิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยาที่มาจากการอุดตัน เนื่องมาจากการเกาะของโค้กจะสามารถสังเกตเห็นได้ แต่คณะผู้วิจัยก็ไม่ได้คิดรวมเข้าไปในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ สำหรับการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาจากการระเหิดของฟอสฟอรัสนั้น ค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา (a) ที่เวลาจำเพาะ (t) นั้น ได้ถูกนิยามเป็นอัตราส่วนของอัตราการเกิดปฏิกิริยาที่เวลา t ต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาด้วยตัวเร่งปฏิกิริยาใหม่ สมการอันดับศูนย์ของค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา แสดงได้ดังนี้

$$-\frac{da}{dt} = k_{deact} \exp(-Ea/RT) \qquad 3.2$$

และภาวะขอบเขต คือ $a = 1$ ที่ $t = 0$

เพื่อต้องการลดค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด และเพิ่มอัตราส่วนของผลิตภัณฑ์ คณะนักวิจัยได้พิจารณาเครื่องปฏิกรณ์ออกเป็น 2 ลักษณะด้วยกัน : 1) การใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีขนาดของรูปทรงต่างกัน และมีคุณสมบัติการถ่ายเทความร้อนต่างกัน ในชั้นเบดบนและล่าง ของเครื่องปฏิกรณ์ และ 2) แบ่งเครื่องปฏิกรณ์ออกเป็นสองส่วนด้วยกัน โดยรักษาอุณหภูมิในสองส่วนต่างกัน จากผลการจำลองของคณะนักวิจัยแสดงให้เห็นว่า การใช้ลักษณะของเครื่องปฏิกรณ์ที่มีการแบ่งตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้เป็นสองขนาด หรือ การแบ่งอุณหภูมิของเกลือภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็นสองค่า จะสามารถลดค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดและเพิ่มอัตราส่วนของผลิตภัณฑ์ได้ คณะนักวิจัยยังได้แนะนำอีกว่าการปรับแต่งอย่างละเอียดของแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์สามารถคาดหมายไว้ก่อนได้ ถ้ามีการรวมผลของความเร็วที่ผนังท่อในการพิจารณาการถ่ายเทความร้อนและพลวัตของของไหล

Baiker และคณะ(1986) ได้ศึกษาพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่ง ชนิดไม่ใช่แอเดียแบติกและไอโซเทอมัล ที่ใช้สำหรับกระบวนการ dehydration ของ toluene ภายใต้อิทธิพลของการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา ที่เกิดจากการเติม thiopene ลงไปในสารตั้งต้นของปฏิกิริยาอย่างต่อเนื่อง ถึงแม้ว่าความลาดชันของอุณหภูมิในแนวรัศมีจะมีความสำคัญ แต่คณะนักวิจัยได้เสนอว่ามีความเป็นไปได้ในการใช้อุณหภูมิเฉลี่ยที่ภาคตัดขวางในการบรรยายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ ถ้าหากว่าระยะทางในแนวรัศมีตลอดจนถึงค่าอุณหภูมิเฉลี่ยภาคตัดขวางมีค่าคงที่ จากเหตุผลดังกล่าวจึงสามารถใช้แบบจำลองชนิด one-dimensional pseudo-homogeneous ในการจำลองเครื่องปฏิกรณ์ สมการของค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา (a) ที่เวลา (t) แสดงได้ดังนี้

$$-\frac{da}{dt} = k_{o,deact} \exp(-\frac{Ea_{deac}}{RT}) P_{thio} a \qquad 3.3$$

ด้วยภาวะขอบเขต ที่ $t = 0, a = 1$

คณะนักวิจัยได้รายงานว่า ค่าของ $k_{o,deact}$ จะมีผลต่อความว่องไวในการเปลี่ยนแปลงพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์เป็นอย่างมาก ในขณะที่ ตัวแปร Ea_{deact} จะมีอิทธิพลน้อยมาก

Eigenberger และ Ruppel (1986) ได้กล่าวถึงปัญหาในการสร้างแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งที่ใช้ในอุตสาหกรรม ซึ่งผู้ทำวิจัยได้รายงานว่าในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งชนิดหลายท่อนั้นจะมีความแตกต่าง ของความดันลดในแต่ละท่อเป็นอย่างมากเมื่อสิ้นสุดช่วงเวลาของการปฏิบัติการ ซึ่งจะทำให้มีความแตกต่างของปริมาณการไหลในแต่ละท่อและส่งผลให้ค่าคงที่ในการถ่ายเทความร้อนลดลง ในบางครั้งจะสังเกตพบว่าเกิดปฏิกิริยาการเผาไหม้ทั้งหมดเพิ่มขึ้น

เมื่อเพิ่มช่วงเวลาในการปฏิบัติการของปฏิกิริยาออกซิเดชันบางส่วนในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งชนิดหลายท่อ ซึ่งการเกิดปฏิกิริยาเผาไหม้ทั้งหมดนั้นจะส่งผลให้มีการลดลงของการเปลี่ยนรูปของสารตั้งต้นหรือภาระของเครื่องปฏิกรณ์และบ่อยครั้งที่ถูกสมมุติให้เป็นสาเหตุของการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา อย่างไรก็ตามก็ยังเป็นคำถามถึงการเพิ่มขึ้นของการกระจายของการไหลที่ไม่แน่นอนในแต่ละท่อ ซึ่งเป็นสาเหตุของปัญหาที่เกิดขึ้นมา

Nicolov และ Anastasov (1989) ได้ดำเนินการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่งที่ใช้ในอุตสาหกรรม(9000 ท่อ,ความยาว 3500 มม., เส้นผ่าศูนย์กลางภายใน 25 มม.) สำหรับการผลิต phthalic anhydride จากปฏิกิริยาออกซิเดชันบางส่วนของ o-xylene จากผลการทดลองพบว่าเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงความเร็วของสารหล่อเย็นจะทำให้อุณหภูมิของสารหล่อเย็นสูงขึ้น ซึ่งคณะผู้ทำการวิจัยได้ตั้งข้อสังเกตว่า ตำแหน่งของอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดจะเลื่อนตำแหน่งขึ้นมาใกล้ทางเข้าของเครื่องปฏิกรณ์มากขึ้นแต่ค่าของอุณหภูมิไม่ได้เพิ่มขึ้น สำหรับค่าการเลือกเกิดเป็น phthalic anhydride ไม่ได้ลดลงในขณะที่ปริมาณของผลิตภัณฑ์ที่ไม่ต้องการหลักคือ phthalide ได้ลดลงเป็นศูนย์

Westerink และคณะ(1990) ได้ทำการทดสอบทางทฤษฎีสำหรับการประยุกต์ใช้แบบจำลองชนิด one-dimensional pseudo-homogeneous ของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดหล่อเย็นแบบท่อ โดยที่แบบจำลองชนิด 1-D ถูกเปรียบเทียบกับแบบจำลองชนิด two-dimensional(2-D) โดยการศึกษาอิทธิพลของตัวแปรที่ออกแบบและปฏิบัติการในสภาวะที่เกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดของเครื่องปฏิกรณ์ คณะผู้วิจัยได้รายงานว่าสำหรับค่าของตัวแปรทั้งหมดที่ใช้สำหรับแบบจำลองชนิด 2-D นั้นพบว่าเกรเดียนท์ของความเข้มข้นในแนวรัศมีนั้นสามารถไม่นำมาคิดรวมในแบบจำลองได้ เนื่องจากมวลไม่สามารถผ่านไปสู่ผนังท่อได้ เพราะว่าไม่มีแรงขับเคลื่อนที่ทำให้มวลผ่านผนังท่อได้ คณะผู้วิจัยได้เสนอแบบจำลองขึ้นมาใหม่ โดยใช้ค่าเฉลี่ยของการเปลี่ยนรูปที่คำนวณได้จากแบบจำลองชนิด 1-D สำหรับการคำนวณโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวรัศมี (เรียกว่า RTPM) ที่เกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด ซึ่ง RTPM จะใช้ในการจำลองอุณหภูมิในแนวรัศมีเฉพาะที่เกิดอุณหภูมิ ที่จุดร้อนจัดเท่านั้น คณะผู้วิจัยได้สรุปว่า การใช้แบบจำลองชนิด 1-D ร่วมกับ RTPM สามารถใช้แทนแบบจำลองชนิด 2-D ได้ในการศึกษาผลที่เกิดจากอุณหภูมิที่จุดร้อนจัด

Nicolov และ Anatasov (1992a) ได้ทำการตรวจสอบอิทธิพลของอุณหภูมิขาเข้าของก๊าซที่มีต่อความสามารถของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่งสำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันบางส่วนของ o-xylene ไปเป็น phthalic anhydride โดยการใช้แบบจำลองชนิด two-dimensional

heterogeneous ในการจำลองพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์และยืนยันผลการจำลองแบบจำลองโดยการทดลองในเครื่องปฏิกรณ์ที่จำลองขนาดจากอุตสาหกรรม ซึ่งคณะผู้วิจัยได้สังเกตว่าค่าอุณหภูมิต่ำสุดที่จุดร้อนจัดจะเป็นฟังก์ชันกับอุณหภูมิขาเข้าในช่วงอุณหภูมิ 120-450 °C และได้เสนอแนะว่าเมื่ออุณหภูมิขาเข้าของก๊าซต่ำปฏิกิริยาไม่สามารถเกิดขึ้นได้ แต่เมื่ออุณหภูมิของก๊าซขาเข้าเพิ่มขึ้นถึงอุณหภูมิหล่อเย็น การเกิดปฏิกิริยาออกซิเดชันจะรุนแรงขึ้นตามความเข้มข้นของ o-xylene ที่ป้อนเข้าไปทำปฏิกิริยา นอกจากนี้แล้วคณะนักวิจัยยังพบว่าอัตราส่วนของ phthalic anhydride ที่ผลิตได้สูงเมื่อมีอุณหภูมิขาเข้าของก๊าซต่ำ

Lopez-Izunza และ Kershenbaum (1992) ได้ใช้แบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-heterogeneous ร่วมกับแบบจำลองการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบผันกลับได้และผันกลับไม่ได้เพื่ออธิบายการสังเกตพบสภาวะคงที่หลายสภาวะในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่งที่จำลองขนาดจากอุตสาหกรรม สำหรับปฏิกิริยาออกซิเดชันของ o-xylene โดยที่แบบจำลองการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบผันกลับได้ที่ใช้นั้นได้ถูกใช้โดยอาศัยหลัก การเปลี่ยนสภาวะออกซิเดชันของตัวเร่งปฏิกิริยา คณะผู้วิจัยได้เสนอแนะว่าสภาวะคงตัวหลายสภาวะจะสัมพันธ์กับการเปลี่ยนแปลงแบบผันกลับได้ของรูปแบบค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาของตัวเร่งปฏิกิริยา นอกจากนี้แล้วการกระจายความร้อนในแนวแกนจะถูกแนะนำให้ใช้ร่วมในแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์ สำหรับชนิดของปฏิกิริยาและเครื่องปฏิกรณ์แบบนี้ คณะผู้วิจัยยังได้เสนอแนะว่าการเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาอาจเกิดจากการเกาะตัวของชั้นโค้กบนผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา

Mongkhonsi (1994) ได้ใช้แบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-homogeneous ร่วมกับแบบจำลองจลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบผันกลับได้ เพื่ออธิบายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่งในสภาวะพลวัต ซึ่งค่าของความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา (a)ที่เวลา (t) แสดงในรูปของระบบสมการได้ดังนี้

$$\frac{da}{dt} = -k_1 P_{ox} a + k_2 P_{o2}(a_m - a) \qquad 3.4$$

เมื่อ $$k_i = k_{i,o} \exp(-Ea/RT) \qquad 3.5$$

จากผลการจำลองพบว่า จลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา มีบทบาทสำคัญในการทำนายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ โดยที่แบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-homogeneous ที่มีการนำเอาจลนพลศาสตร์การเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาแบบผันกลับได้ร่วมกับแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์สามารถทำนายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ทั้งในสภาวะคงตัวและ

สภาวะพลวัตได้ดีกว่าแบบจำลองที่ที่ซับซ้อนแต่ไม่ได้นำเอาจลนพลศาสตร์ของการเสื่อมร่วมกับแบบจำลองเครื่องปฏิกรณ์

Papageorgiou และ Froment (1996) ได้ใช้แบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-homogeneous เพื่ออธิบายถึงแนวทางในการเพิ่มค่าการเลือกเกิดเป็น phthalic anhydride ในปฏิกิริยาออกซิเดชันของ o-xylene ที่ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาชนิด V_2O_5/TiO_2 โดยยึดหลักที่ว่าสมรรถนะของตัวเร่งปฏิกิริยาจะขึ้นกับสภาวะในการปฏิบัติการ(อุณหภูมิและความดันย่อยของออกซิเจน) โดยการจำลองเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในอุตสาหกรรมที่มีการบรรจุตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นสองชั้นเบดโดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยามีค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาต่างกันดังนี้ในชั้นบนของเบดจะมีค่าความว่องในการเกิดปฏิกิริยาต่ำกว่าเพื่อหลีกเลี่ยงการเกิดอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดที่สูงไป ในขณะที่ชั้นล่างของเบดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาสูงกว่าเพื่อให้มีการเปลี่ยนรูปของ 0-xylene อยู่ในช่วง 99-100 % จากผลการจำลองพบว่าวิธีการปรับปรุงค่าการเลือกเกิดเป็น phthalic anhydride ให้ดีขึ้นนั้นทำได้โดยการรักษาค่าความดันย่อยของออกซิเจนให้ต่ำที่สุดเท่าที่เป็นไปได้แต่ต้องเป็นค่าที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนรูปของ o-xylene อย่างสมบูรณ์ ในขณะที่อุณหภูมิที่จุดร้อนจัด จะเกิดขึ้นทั้งสองชั้นเบดโดยที่ชั้นบนจะมีอุณหภูมิสูงกว่าชั้นล่าง คณะนักวิจัยได้สรุปว่าการมีความเข้าใจที่ดีในกลไกและจลนพลศาสตร์ของกระบวนที่ใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาจะนำไปสู่การออกแบบและควบคุมการปฏิบัติการที่สภาวะเหมาะสมในเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ในอุตสาหกรรม

3.2 การเลือกแบบจำลอง

ก่อนที่จะมีการพัฒนาแบบจำลองนั้น วัตถุประสงค์ในการใช้งานแบบจำลองที่ได้พัฒนาขึ้นมาควรจะต้องระบุให้ชัดเจน สำหรับในงานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อใช้แบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ชนิดใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบเบดนิ่งที่ได้พัฒนาอย่างเหมาะสมและน่าเชื่อถือสำหรับทำนายโพรไฟล์ของอุณหภูมิในแนวแกน แต่ปัญหาต่อไปที่จะต้องเผชิญคือจะเลือกแบบจำลองชนิดไหน ที่จะนำมาใช้ในการพัฒนาแบบจำลองตามวัตถุประสงค์ของงานวิจัย Fedeyo de Azevedo และคณะ (1990) ได้ให้แนวทางในการปฏิบัติสำหรับการเลือกแบบจำลองที่ไม่ซับซ้อน เพื่อที่จะใช้ในงานวิจัยไว้ดังต่อไปนี้

1) แบบจำลองไม่ควรจะมีรายละเอียดมากเกินกว่าความจำเป็นสำหรับวัตถุประสงค์ที่วางไว้ในงานวิจัย
2) แบบจำลองควรจะมีตัวแปรน้อยที่สุดเท่าที่เป็นไปได้

3) ตัวแปรต่างๆของแบบจำลองที่เลือกควรจะมีความเกี่ยวพันกันอย่างน่าเชื่อถือจริง
4) ความพยายามในการคำนวณทางคณิตศาสตร์ซึ่งจำเป็นสำหรับการแก้ปัญหานั้นควรจะเป็นไปอย่างมีเหตุผล

ในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดนิ่ง ชนิด one-dimensional นั้นจะมีจุดกินทนะ (discretized point) เพียงจุดเดียวต่อภาคตัดขวาง ที่ใช้สำหรับการแสดงค่าเฉลี่ยของอุณหภูมิและความเข้มข้นที่ภาคตัดขวางนั้นๆ แต่ในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ของเครื่องปฏิกรณ์ชนิด two-dimensional จำเป็นต้องใช้จุดกินทนะ อย่างน้อย 2 จุด ต่อภาคตัดขวาง คือในแนวแกนและแนวรัศมีในการสร้างโพรไฟล์ของอุณหภูมิและ ความเข้มข้น ซึ่งจะได้ค่าที่ถูกต้องกว่าแบบจำลอง ชนิด one-dimensional เนื่องจากมีความละเอียดมากกว่า จากเหตุผลดังกล่าว จึงพิจารณาเลือกแบบจำลองชนิด two-dimensional สำหรับในงานวิจัยนี้

ก่อนที่จะตัดสินใจว่าแบบจำลองที่จะใช้ในงานวิจัยนี้จะเป็นชนิด preudo-homogeneous หรือ heterogeneous ให้พิจารณาหัวข้อดังต่อไปนี้

1) ยิ่งแบบจำลองที่มีความซับซ้อนมากเท่าไหร่ก็จะมีจำนวนตัวแปรจำนวนมากที่ยากที่จะหาค่าที่ถูกต้องแม่นยำจากทฤษฎีหรือจากความเกี่ยวพันกัน
2) วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือพัฒนาแบบจำลองที่เหมาะสมสำหรับทำนายตัวแปรซึ่งก็คือ อุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์

สำหรับในหัวข้อแรกได้เสนอแนะว่า เฉพาะตัวแปรต่างๆที่บรรยายถึงปรากฏการณ์ทางกายภาพเท่านั้นที่สามารถหาค่าได้ถูกต้องแม่นยำ ส่วนตัวแปรอื่นๆที่ไม่เกี่ยวข้องถ้ายิ่งมีมากเท่าไหร่ก็จะทำให้การทำนายผลของแบบจำลองผิดพลาดมากขึ้น ส่วนในหัวข้อที่สองนั้นหมายความว่าแบบจำลองต้องสามารถทำนายพฤติกรรมของเครื่องปฏิกรณ์ได้ก่อนที่จะเกิดขึ้นจริง ยิ่งกว่านั้นเวลาระหว่างที่จะได้ผลการทำนายกับสิ่งที่เกิดขึ้นจริงจะต้องมีเวลาพอที่จะควบคุมระบบเพื่อปฏิบัติการใดๆได้ถ้าจำเป็น

Dixon และคณะ (1978) ได้ชี้ให้เห็นว่าแบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-homogeneous ซึ่งมีการกระจายความร้อนในแนวแกนและในแนวรัศมี สามารถอธิบายการกระจายของอุณหภูมิในเครื่องปฏิกรณ์ได้อย่างเพียงพอ นอกจากนี้แล้วเกณฑ์ที่ Wei และคณะ (1984) ได้เสนอว่า ในเครื่องปฏิกรณ์แบบนี้จะมีค่า dimensionless heat transfer parameter(θ) มากกว่า 50 ค่า

อุณหภูมิเฉลี่ยระหว่างเฟสของแข็งและก๊าซแตกต่างกันน้อยมากซึ่งทำให้สามารถใช้แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous ทำนายได้เพียงพอ

สำหรับเหตุผลอื่นที่สนับสนุนในการเลือกแบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous สำหรับใช้ในงานวิจัยนี้ คือระบบการวัดอุณหภูมิภายในเครื่องปฏิกรณ์ไม่ได้ออกแบบให้สามารถวัดอุณหภูมิที่แยกกันได้ระหว่างของแข็งและก๊าซ แต่เป็นการวัดอุณหภูมิเฉลี่ยของทั้งสองเฟส ดังนั้นถ้าเลือกแบบจำลองชนิด heterogeneous เพื่อใช้ทำนายอุณหภูมิของของแข็งและก๊าซ แล้วก็จะไม่สามารถเปรียบเทียบกับอุณหภูมิที่วัดได้เพราะเป็นการวัดค่าอุณหภูมิเฉลี่ยของทั้งสองเฟส ดังนั้นถ้าเลือกแบบจำลองชนิด heterogeneous เพื่อทำนายค่าอุณหภูมิของของแข็งและก๊าซ แต่จะไม่สามารถเปรียบเทียบกับอุณหภูมิที่วัดได้จากเครื่องปฏิกรณ์ จากเหตุผลดังกล่าวในงานวิจัยนี้จึงเลือกใช้แบบจำลองชนิด pseudo-homogeneous

นอกจากนี้แล้วยังมีคำถามว่าจะรวมหรือไม่รวมพจน์ของการกระจายมวลและความร้อนในแนวแกน ซึ่งมีสร้างเกณฑ์ต่างๆขึ้นมาเพื่อตัดสินว่า ในสภาวะใดที่ไม่ต้องรวมพจน์ของการกระจายในแนวแกน ในการพัฒนาแบบจำลอง ตัวอย่างเช่น Carberry และ Wendel (1963) ได้เสนอแนะว่าควรสมมุติให้การกระจายในแนวแกนมีอิทธิพลน้อยมากในกรณีที่อัตราส่วนของความยาวของเบดต่อเส้นผ่าศูนย์กลางของตัวเร่งปฏิกิริยามีค่ามากกว่า50 ในขณะที่ Yong และ Finlayson (1973) ได้พัฒนาเกณฑ์ (เป็นอิสระต่อความยาวของเครื่องปฏิกรณ์) ในพจน์ของการเปลี่ยนของอุณหภูมิและการเปลี่ยนรูปของสารตั้งต้นสูงสุด โดยได้เสนอแนะว่าจะไม่คิดพจน์ของการกระจายความร้อนและมวลในแนวแกน เมื่ออยู่ในภาวะดังต่อไปนี้

$$\max_{z}\left[\frac{1}{Pe_{ha}}\frac{dY}{d(z/d_p)}\right] \le 1 \qquad \text{และ} \qquad \max_{z}\left[\frac{1}{Pe_{ma}}\frac{dX}{d(z/d_p)}\right] \le 1 \qquad 3.6$$

X = 1-C/Cin เป็น อัตราส่วนของการเปลี่ยนรูป

Y = (T-Tw)/(Tin-Tw) เป็น ค่าอุณหภูมิไร้มิติ และ Pe_{ha},Pe_{ma} เป็น axial peclet number ของมวลและความร้อนตามลำดับ

เนื่องจากว่าพจน์ของการกระจายจะมีความสามารถในการทำให้เกรเดียนท์ของความชันราบเรียบได้ เมื่อมีการคิดพจน์ของของการกระจายในแนวแกนร่วมในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ ซึ่งทำให้ผลของการทำนายค่าอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดจะต่ำกว่าและกว้างกว่าแบบจำลองที่ไม่คิดพจน์ของการกระจายความร้อนในแนวแกน [Finlayson] [ในงานวิจัย Mongkhonsi (1994)] แต่ก็

มีงานวิจัยที่แสดงว่าแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ที่ไม่รวมพจน์ของการกระจายในแนวแกนสามารถทำนายอุณหภูมิที่จุดร้อนจัดได้สูงกว่าค่าที่สังเกตได้จากการทดลอง [Kersheenbaum และ Lopez-Izunza (1986)] ดังนั้นในการรวมพจน์ของการกระจายในแนวแกนเข้าไปในแบบจำลองของเครื่องปฏิกรณ์ซึ่งจะเป็นไปตามการแนะนำของกลุ่มนักวิจัยเช่น[Paterson และ (1983), Lopez-Izunza และ Kershenbaum (1992)] นั้นจะไม่สามารถปรับปรุงให้ การทำนายแบบจำลองสำหรับระบบเครื่องปฏิกรณ์และปฏิกิริยาในงานวิจัยให้ดีขึ้นได้

จากการพิจารณามาทั้งหมดจึงมีการพิจารณาเลือกแบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo homogeneous ที่ไม่มีการผสมในแนวแกน

3.3 แบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo homogeneous

เซตของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่บรรยายถึงสมดุลมวลและความร้อนในสภาวะคงตัวของเครื่องปฏิกรณ์ แสดงได้ต่อไปนี้

สมดุลมวล

สำหรับสารลำดับที่ iในสมการ

$$-\varepsilon u\frac{\partial c_i}{\partial z}+\varepsilon De_r\left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial c_i}{\partial r}\right)+\rho_B\sum_{j=1}^{n}\upsilon_{ij}R_j(C,T) \quad =0 \qquad 3.7$$

สมดุลความร้อน

$$-\varepsilon u\rho_g c_{p,g}\frac{\partial T}{\partial Z}+k_{eff}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}\right)+\rho_B\sum_{j=1}^{n}(-\Delta HR)_j R_j(C,T) \quad =0 \qquad 3.8$$

ภาวะขอบเขตของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย

วัตถุประสงค์ของงานวิจัยนี้คือแก้สมการอนุพันธ์ย่อยของสมดุลมวลและสมดุลความร้อนเพื่อหา อุณหภูมิและการเปลี่ยนรูปของสารตั้งต้นที่จุดต่างๆในชั้นเบด ซึ่งการแก้ปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยแบบนี้เป็นปัญหาแบบค่าเริ่มต้น ซึ่งภาวะขอบเขต (ในทิศทางตามแนวแกน) ที่จำ-

เป็นต้องใช้ในการแก้สมการนั้นมีเฉพาะที่ทางเข้า, ที่ศูนย์กลางของแนวแกน และที่ผนังของเครื่องปฏิกรณ์ สำหรับสมการของภาวะขอบเขต ซึ่งแสดงอยู่ในรูปของระบบสมการไม่เชิงเส้น มีดังต่อไปนี้

$r = 0$ และ $0 \le z \le L$

$$\frac{\partial c_i}{\partial r} = 0 \qquad 3.9$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} = 0 \qquad 3.10$$

$r = R_o$ และ $0 \le z \le L$

$$\frac{\partial c_i}{\partial r} = 0 \qquad 3.11$$

$$-k_{eff}\frac{\partial T}{\partial r} = h_w(T - T_w) \qquad 3.12$$

$z = 0$ และ $0 \le r \le R_o$

$$c_i(r,0) = c_{i,0} \qquad 3.13$$

$$T(r,0) = T_o \qquad 3.14$$

3.4 แบบจำลองค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา

สำหรับแบบจำลองค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาที่ใช้ร่วมกับแบบจำลองชนิด two-dimensional pseudo-homogeneous เพื่อใช้สำหรับพัฒนาแบบจำลองในงานวิจัยนี้นั้นเป็นแบบจำลองที่เสนอโดย Mongkhosi (1994) ซึ่งมีรายละเอียดดังนี้

ค่าความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาได้ถูกนิยามว่าเป็นอัตราส่วนระหว่างอัตราการหายไปของ o-xylene จากการวัดต่ออัตราการหายไปของ o-xylene ที่ได้จากการทำนายจากจลนพลศาสตร์ของ Calderbank โดยที่ Vanhove และ Blanchard (1975) ได้รายงานว่า การที่จะมีค่าความสามารถในการเลือกเกิดเป็น phthalic anhydride ที่ดีที่สุดนั้น ก็ต่อเมื่อมีการนำเอาผลิตภัณฑ์ขั้นกลางส่วนใหญ่ (เช่นo-tolualdehyde,phthalide) เข้าไปเกี่ยวข้องด้วย ดังนั้นสารที่ถูกดูดซับซึ่งสามารถทำให้เกิดเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ถูกสมมุติให้เกิดขึ้นจากปฏิกิริยาออกซิเดชันที่ไม่เลือกของ o-xylene ซึ่งปฏิกิริยานี้ยังได้ถูกเสนอแนะโดย Bond และ Konig (1982) ซึ่งได้รายงานว่าสารประกอบเหล่านี้สามารถกำจัดออกไปได้โดยการเพิ่มความดันย่อยของออกซิเจน จากผลดังกล่าวข้างต้น จึงได้มีการเสนอแบบจำลองชนิด "ดีแอกติเวชัน-รีแอกติเวชัน" โดยยึดหลักสมดุลของพื้นที่ผิวที่มีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งแสดงอยู่ในรูปของสมการดังนี้

$$\frac{da}{dt} = -k_1 P_{ox} a + k_2 P_{o2}(1-a) \qquad 3.15$$

เมื่อ $$k_i = k_{i,o} \exp(-Ea / RT) \qquad 3.16$$

พจน์แรกทางขวาของสมการที่ (3.15) แสดงถึงอัตราการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งถูกสมมุติให้เป็นฟังก์ชันของ ความดันย่อยของ o-xylene และสัดส่วนของพื้นผิวที่มีความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา สำหรับพจน์ที่สองนั้นแสดงถึงอัตราความว่องในการเกิดปฏิกิริยาอีกครั้งหนึ่ง ซึ่งถูกสมมุติให้เป็นฟังก์ชันของความดันย่อยของออกซิเจนและสัดส่วนของพื้นผิวที่ไม่ว่องไวในการเกิดปฏิกิริยา ในช่วงอายุการใช้งานของตัวเร่งปฏิกิริยานั้น ตัวเร่งปฏิกิริยาอาจจะมีการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้ และ/หรือผันกลับไม่ได้ โดยสารประกอบบางตัวที่ถูกดูดซับไว้เป็นอย่างมากซึ่งสามารถรักษากระบวนการ การมีความว่องในการเกิดปฏิกิริยาอีกครั้งหนึ่งไว้ ดังนั้นจึงได้มีการนำเอาค่าตัวแปรของค่าความว่องไวสูงสุดที่สามารถมีได้ (a_m) มาใช้ร่วมในแบบจำลอง สำหรับค่า a_m ได้ถูกนิยามไวดังนี้ a_m

$$a_m = 1 - a_{1,ir} - a_{1,sr} \qquad 3.17$$

โดยที่ค่า $a_{1,ir}$ เป็นค่าการสูญเสียความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาโดยการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับไม่ได้ และ ค่า $a_{1,sr}$ เป็นค่าการสูญเสียความว่องไวในการเกิดปฏิกิริยาโดยการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับได้โดยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้อย่างมั่นคง ดังนั้นสมการที่ (3.15) สามารถปรับปรุงไปเป็นรูปแบบดังต่อไปนี้

$$\frac{da}{dt} = -k_1 P_{ox} a + k_2 P_{o2}(a_m - a) \qquad 3.18$$

โดยค่า k_1และk_2 จะมีค่าตามสมการที่3.16 ตัวแปร a_m นั้น ถูกนำมาใช้เพื่อชดเชยสำหรับการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับไม่ได้ ถ้าไม่มีการเสื่อมความว่องในการเกิดปฏิกิริยาแบบผันกลับไม่ได้เกิดขึ้นและสารประกอบที่ถูกดูดซับถูกกำจัดออกได้ทั้งหมด ค่าของ a_m เท่ากับหนึ่ง [สมการ 3.15] ถ้าสภาวะการปรับสภาพครั้งใหม่ไม่ดีพอ เช่นในสภาวะที่ อุณหภูมิต่ำเกินไป หรือเวลาที่ใช้น้อยเกินไป จะมีบางส่วนของพื้นผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาที่ยังถูกปกคลุมไปด้วยสารประกอบที่ถูกดูดซับไว้ ค่าของ a_m จะมีค่าน้อยกว่าหนึ่ง ในช่วงระยะเวลาของปฏิกิริยาที่สภาวะปฏิบัติการนั้นสารประกอบที่เกาะสะสมบนพื้นผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น ดังนั้นค่า a_m จะลดลงเมื่อเวลาเพิ่มขึ้น ในทำนองเดียวกันเมื่อมีการเปลี่ยนแปลงใดๆ ที่ทำให้สนับสนุนให้กระบวนการปรับสภาพใหม่ของตัวเร่งปฏิกิริยาเกิดได้ดีขึ้น (เช่น การเพิ่มอุณหภูมิเกลือหล่อเย็น)