



การหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

โดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

MULTIPLE REACTION OPTIMIZATION IN CSTR REACTOR BY MACRO

PROGRAM IN MICROSOFT EXCEL

นางสาวมาริษา เมืองเดช รหัส 58366177

นางสาววีรวรรณ แซ่วิว รหัส 58366221

ปริญญาานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม

คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

ปีการศึกษา 2561

ชื่อหัวข้อโครงการ	การหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง โดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล
ผู้ดำเนินโครงการ	นางสาวมาริษา เมืองเดช รหัส 58366177 นางสาววิรวรรณ แซ่วิว รหัส 58366221
ที่ปรึกษาโครงการ	ดร.สุทธิพงษ์ ทรงประวัตติ
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
ภาควิชา	วิศวกรรมอุตสาหกรรม
ปีการศึกษา	2561

บทคัดย่อ

งานวิจัยฉบับนี้ได้ทำการออกแบบการเขียนโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลโดยใช้การบันทึกแมโครเอกซ์เซลร่วมกับโปรแกรม VBA (Visual basic for Application) โดยมีวัตถุประสงค์เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนียในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องภายใต้สภาวะไม่คงที่

ในการดำเนินงานวิจัยคณะผู้จัดทำได้ศึกษากระบวนการสลายตัวของแอมโมเนียพร้อมทั้งกำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหา จากนั้นทำการออกแบบการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมและ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล และหาสภาวะที่เหมาะสมของการสลายตัวของแอมโมเนียโดยแมโครโปรแกรมและ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลร่วมกับโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) จากนั้นจึงได้จัดทำเอกสารคู่มือแนะนำการใช้งานโปรแกรม เพื่อให้สะดวกต่อผู้ที่สนใจศึกษาในงานวิจัยฉบับนี้ จากการออกแบบการเขียนโปรแกรมทำให้ได้สภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องของกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนียที่อุณหภูมิ 975 เคลวิน ความดัน 3.5 บาร์ และปริมาตร 125 ลูกบาศก์เมตร ได้ร้อยละการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนเท่ากับ 98

Project Title	Multiple Reaction Optimization in CSTR Reactor by Macro program in Microsoft Excel		
Author	Marisa	Moangdech	ID 58366177
	Weerawan	Saewue	ID 58366221
Project Advisor	Dr.Suttpong	Songprawat	
Major	Chemical Engineering		
Department	Industrial Engineering		
Academic year	2018		

Abstract

This research has designed programming in Microsoft Excel by using macro-Excel recording in conjunction with the Visual basic for application. The objective is to find the optimal conditions for the ammonia decomposition process in a CSTR reactor under unsteady state conditions.

Moreover, in conducting research, the organizers study the decomposition of ammonia, determine the requirements, and analyze the problems. In addition, the program is designed by the macro program and VBA (Visual basic for application) in Microsoft Excel with Minitab 18. On the other hands, we can prepare a manual for using the program to be useful designed program for other interested people to study in this research. The optimum conditions in the CSTR reactor of ammonia decomposition process at 975 Kelvin, 3.5 bar pressure and 125 cubic meters of volume can be converted to 98.

กิตติกรรมประกาศ

ปริญญานิพนธ์ฉบับนี้ สำเร็จลุล่วงไปได้ด้วยดี เพราะได้รับความช่วยเหลือจากหลายๆฝ่าย โดยเฉพาะอาจารย์ ดร.สุทธิพงษ์ ทรงประวัตติ อาจารย์ที่ปรึกษาโครงการ รวมถึงอาจารย์กรรมการโครงการ ที่ได้ให้คำแนะนำ คำปรึกษา แนะนำวิธีแก้ปัญหา และข้อคิดเห็นต่างๆ ในการดำเนินงานวิจัยด้วยดีมาโดยตลอด และขอบคุณอาจารย์ประจำสาขาวิศวกรรมเคมี มหาวิทยาลัยนเรศวรทุกท่าน ที่ได้ให้วิชาความรู้ เพื่อนำมาประยุกต์ใช้ในการทำปริญญานิพนธ์ฉบับนี้

สุดท้ายนี้ผู้ดำเนินโครงการใคร่กราบขอบพระคุณ บิดา มารดา ที่ได้ให้การดูแล อบรมสั่งสอน และให้กำลังใจด้วยดีเสมอมา ตลอดการดำเนินโครงการจนสำเร็จการศึกษา



ผู้ดำเนินโครงการวิศวกรรม

นางสาวมาริษา เมืองเดช

นางสาววิรวรรณ แซ่วื่อ

พฤษภาคม 2562

สารบัญ

หน้า

ใบรับรองปริญญาโท.....	ก
บทคัดย่อ.....	ข
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ (Abstract).....	ค
กิตติกรรมประกาศ.....	ง
สารบัญ.....	จ
สารบัญตาราง.....	ฉ
สารบัญรูป.....	ฎ
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของงานวิจัย.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....	3
1.3 ขอบเขตงานวิจัย.....	3
1.4 สถานที่ในการดำเนินงานวิจัย.....	3
1.5 ระยะเวลาในการดำเนินงานวิจัย.....	3
1.6 ขั้นตอนการดำเนินงาน.....	4
1.7 ผลที่คาดว่าจะได้รับ.....	5
บทที่ 2 เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	6
2.1 สมบัติทางเคมีและกายภาพของแอมโมเนีย.....	6
2.2 การสลายตัวแอมโมเนีย	6
2.3 Rate expressions.....	7

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

2.4 Rate coefficients.....	7
2.5 Adsorption equilibrium constants.....	8
2.6 Equilibrium constants.....	8
2.7 สมมุติฐานของแบบจำลอง.....	9
2.8 ปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการสลายตัวของปฏิกิริยาแอมโมเนีย.....	9
2.8.1 นิยามของอัตราเร็วปฏิกิริยา.....	9
2.8.2 กฎอัตรา (Rate law).....	10
2.8.3 ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา.....	13
2.8.4 ค่าพลังงานก่อกัมมันต์.....	13
2.8.4.1 ลักษณะสำคัญของพลังงานก่อกัมมันต์.....	14
2.8.5 การเปลี่ยนแปลงพลังงานของสารในระหว่างการดำเนินไปของปฏิกิริยา.....	14
2.8.5.1 ปฏิกิริยาคูดความร้อน.....	14
2.8.5.2 ปฏิกิริยาคายความร้อน.....	14
2.8.6 การหาค่าพลังงานก่อกัมมันต์.....	15
2.8.7 ปัจจัยที่มีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา.....	16
2.8.7.1 ธรรมชาติของสารตั้งต้น.....	16
2.8.7.2 ความเข้มข้นของสารตั้งต้น.....	16
2.8.7.3 พื้นที่ผิวสัมผัสของสารตั้งต้น.....	16
2.8.7.4 ความดัน.....	17
2.8.8 อุณหภูมิ.....	17
2.8.9 ตัวเร่งปฏิกิริยา.....	17
2.8.9.1 ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อเดียว.....	17
2.8.9.2 ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อผสม.....	18

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.8.10 ตัวหน่วงปฏิกิริยา.....	18
2.9 ประเภทของเครื่องปฏิกรณ์.....	19
2.9.1 เครื่องปฏิกรณ์แบบกะ.....	19
2.9.1.1 หลักการทำงาน.....	20
2.9.1.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม.....	20
2.9.2 เครื่องปฏิกรณ์แบบไหลต่อเนื่อง.....	20
2.9.2.1 หลักการทำงาน.....	21
2.9.2.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม.....	21
2.9.3 เครื่องปฏิกรณ์แบบแบบเฟดแบทช์.....	21
2.9.3.1 หลักการทำงาน.....	21
2.9.3.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม.....	21
2.10 สมการการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง.....	22
2.10.1 สมการสมดุลโมล.....	22
2.10.2 สมดุลพลังงานของถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง.....	23
2.10.3 Stoichiometry.....	26
2.10.4 ปริมาณสัมพันธ์สำหรับก๊าซ (Stoichiometry for gas phase).....	29
2.11 Microsoft Excel.....	30
2.11.1 ประโยชน์ของไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	30
2.12 Macro Excel.....	31
2.12.1 ภาษาที่ใช้บันทึกแมโคร.....	31
2.12.2 ประโยชน์ของแมโคร.....	31
2.12.3 ประเภทของการบันทึกแมโครในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	32
2.12.4 แหล่งเก็บแมโครในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	32

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
2.13 วิธีตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม.....	32
2.14 การออกแบบคอมโพสิตกลาง (Central Composite Design).....	33
2.15 โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18).....	34
2.16 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง.....	35
บทที่ 3 วิธีดำเนินการในงานวิจัย.....	38
3.1 กำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหา.....	39
3.2 การออกแบบโปรแกรม.....	40
3.2.1 การระบุข้อมูลขาเข้า.....	40
3.2.2 การระบุข้อมูลขาออก.....	41
3.3 Visual Basic for Applications : VBA.....	41
3.3.1 การเพิ่ม Developer Tab.....	41
3.3.2 การเปิดใช้งานหน้าต่าง VBA.....	42
3.4 User form.....	44
3.5 Command Button.....	47
3.6 Goal Seek.....	48
3.7 การเขียนโปรแกรม (coding).....	49
3.7.1 หน้าต่างเริ่มต้นของโปรแกรม.....	49
3.7.2 หน้าต่างแนะนำผู้จัดทำ (ปุ่ม Provider).....	50
3.7.3 หน้าต่างถึงปฏิกรณ์และสมการเคมี (ปุ่ม Reaction).....	51
3.7.4 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม (ปุ่ม Start Program).....	52
บทที่ 4 ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง.....	61

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

4.1 ผลการทดลองจากโปรแกรมเอกซ์เซล.....	61
4.2 การวิเคราะห์อุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน.....	64
4.3 วิเคราะห์ความสัมพันธ์ของเวลาที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน.....	65
บทที่ 5 บทสรุปและข้อเสนอแนะ.....	67
5.1 สรุปผลการดำเนินงาน.....	67
5.1.1 ศึกษาการหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	67
5.1.2 เพื่อศึกษาและเรียนรู้ขั้นตอนและกระบวนการการเขียนโปรแกรมด้วยแมโคร และ VBA (Visual basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	67
5.1.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนียผ่านการออกแบบการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	67
5.1.3.1 การวิเคราะห์อุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน.....	67
5.1.3.2 วิเคราะห์ความสัมพันธ์ของเวลาที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน.....	68
5.2 ข้อเสนอแนะ.....	68
เอกสารอ้างอิง.....	69
ภาคผนวก ก	73
ภาคผนวก ข	78
ภาคผนวก ค	100
ภาคผนวก ง.....	106

สารบัญตาราง

หน้า

ตารางที่ 1.1 ขั้นตอนการดำเนินงาน.....4



สารบัญรูปภาพ

หน้า

รูปที่ 2.1 การเปลี่ยนแปลงพลังงานสำหรับ ก. ปฏิริยาคายความร้อน ข. ปฏิริยาดูดความร้อน.....	14
รูปที่ 2.2 กราฟแสดงการดำเนินไปของปฏิริยาที่มีตัวเร่งปฏิริยา และไม่มีตัวเร่งปฏิริยา.....	18
รูปที่ 2.3 แสดงพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิริยาที่มีตัวหน่วง และไม่มีตัวหน่วงปฏิริยา.....	19
รูปที่ 2.4 การทำงานของ Batch reactor ช่วงเวลาต่างๆ.....	19
รูปที่ 2.5 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลและแบบถังกวนในอุดมคติ.....	20
รูปที่ 2.6 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบ Fed batch reactor ในช่วงเวลาต่างๆ.....	21
รูปที่ 2.7 ถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง CSTR.....	22
รูปที่ 2.8 Central Composite Design สำหรับ 3 Factor	34
รูปที่ 3.1 ผังงานแสดงขั้นตอนดำเนินงาน.....	38
รูปที่ 3.2 PFD การสลายตัวของแอมโมเนียในเครื่องปฏิกรณ์แบบเมมเบรนร่วมกับระบบเซลล์เชื้อเพลิงโซลิดออกไซด์ (SOFC)	39
รูปที่ 3.3 ผังงานแสดงขั้นตอนการออกแบบโปรแกรม.....	40
รูปที่ 3.4 การเพิ่มแถบ.....	41
รูปที่ 3.5 การเพิ่มแถบ Developer	42
รูปที่ 3.6 แถบเครื่องมือต่างๆของแถบ.....	42
รูปที่ 3.7 การเปิดหน้าต่าง VBA	42
รูปที่ 3.8 หน้าต่างของ Visual Basic	43
รูปที่ 3.9 หน้าต่างของ Module	43

สารบัญรูปภาพ (ต่อ)

	หน้า
รูปที่ 3.10 หน้าต่างของ Procedure.....	43
รูปที่ 3.11 การตั้งชื่อ Procedure	44
รูปที่ 3.12 แสดงแถบเครื่องมือประมวลผลทดสอบโปรแกรม.....	44
รูปที่ 3.13 การเปิดหน้าต่าง User Form	45
รูปที่ 3.14 หน้าต่างการสร้าง User Form	45
รูปที่ 3.15 หน้าต่าง User Form 1.....	45
รูปที่ 3.16 หน้าต่าง User Form 1.....	46
รูปที่ 3.17 หน้าต่าง Project Explorer	46
รูปที่ 3.18 หน้าต่าง Properties	47
รูปที่ 3.19 การสร้างปุ่ม Command Button	47
รูปที่ 3.20 ปุ่ม Command Button	48
รูปที่ 3.21 หน้าต่างการเปิด Goal Seek	48
รูปที่ 3.22 หน้าต่างการใช้งาน Goal Seek	49
รูปที่ 3.23 หน้าต่างเริ่มต้นของโปรแกรม.....	49
รูปที่ 3.24 หน้าต่างปุ่ม Provider	50
รูปที่ 3.25 หน้าต่างแนะนำผู้จัดทำ	50
รูปที่ 3.26 หน้าต่างปุ่ม Reaction	51
รูปที่ 3.27 หน้าต่างถึงปฏิกรณ์และสมการเคมี.....	51
รูปที่ 3.28 หน้าต่าง ปุ่ม Start Program	52

สารบัญรูปภาพ (ต่อ)

	หน้า
รูปที่ 3.29 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม.....	53
รูปที่ 4.1 สภาวะที่เหมาะสม โดยใช้ฟังก์ชัน Response Optimization จากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18).....	61
รูปที่ 4.2 ค่า P-Value และ ค่า R-Squared ที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนจากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18).....	62
รูปที่ 4.3 ผลลัพธ์ที่ได้จากการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล.....	63
รูปที่ 4.4 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน.....	64
รูปที่ 4.5 แสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนในรูปกราฟ 3 มิติ.....	64
รูปที่ 4.6 ความสัมพันธ์ของการแปลงผัน (Conversion) กับเวลาของมีเทน.....	65

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของงานวิจัย

ในปัจจุบัน มลพิษทางอากาศส่วนใหญ่มาจาก คาร์บอนไดออกไซด์, คาร์บอนมอนอกไซด์, ไนโตรเจนไดออกไซด์, ซัลเฟอร์ไดออกไซด์ และ แอมโมเนีย ที่ถูกปล่อยมาจากโรงงานอุตสาหกรรม ซึ่งการเพิ่มขึ้นของแอมโมเนียในชั้นบรรยากาศ ส่งผลให้อิออนในชั้นบรรยากาศหมดไปเรื่อยๆ ทำให้เกิดภาวะโลกร้อนและยังเกิดฝนกรด ซึ่งสิ่งเหล่านี้ต่างส่งผลให้เกิดอันตรายต่อสุขภาพของประชากรโลก ทำให้ได้มีแนวทางในการพัฒนาเพื่อลดแอมโมเนียในชั้นบรรยากาศด้วยวิธีการสลายแอมโมเนีย โดยแอมโมเนียจะเสถียรที่อุณหภูมิปกติ แต่จะสลายตัวให้ไนโตรเจนและไฮโดรเจนที่อุณหภูมิสูงและความดันบรรยากาศปกติ การสลายตัวเริ่มต้นที่อุณหภูมิ 723-773 เคลวิน [2]

จากงานวิจัยของ M.E.E. Abashar และคณะ ได้ทำการทดลองเพื่อหาสภาวะที่ทำให้แอมโมเนียสลายตัวไปหมดในเครื่องปฏิกรณ์หมุนแบบตัวเร่งปฏิกิริยา ภายใต้สภาวะคงที่ [4] และจากงานวิจัยของ Fakhteh Siavashi และคณะ ได้ทำการทดลองเช่นเดียวกันกับงานวิจัยของ M.E.E. Abashar จากการทดลองทำให้ได้ผลิตภัณฑ์เป็นมีเทน [25] ซึ่งในการออกแบบการทดลองส่วนใหญ่มักจะพบปัญหาในเรื่องค่าใช้จ่าย งบประมาณที่ใช้ในการทำการทดลอง เช่น ค่าใช้จ่ายของสารเคมีที่มีราคาสูง ค่าวัสดุอุปกรณ์ที่ใช้ในการทดลอง รวมถึงระยะเวลาที่ใช้ในการทำการทดลอง เป็นต้น ทำให้มีการประยุกต์ใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์มาช่วยในการออกแบบการทดลอง เช่น โปรแกรม Aspen plus ถึงแม้ว่าโปรแกรม Aspen plus จะสามารถช่วยออกแบบการทดลองได้ แต่ยังพบปัญหาเรื่องค่าใช้จ่ายลิขสิทธิ์การใช้งานโปรแกรม จากปัญหาดังกล่าวทางคณะผู้จัดทำจึงได้นำโปรแกรมไมโครซอฟท์เอกซ์เซลมาประยุกต์ใช้ในการออกแบบการทดลอง เนื่องจากเป็นโปรแกรมหลักที่รู้จักกันดี และใช้งานมาอย่างยาวนาน รวมถึงไม่ต้องเสียค่าลิขสิทธิ์การใช้งานโปรแกรม

โปรแกรมไมโครซอฟท์เอกซ์เซลเป็นโปรแกรมประเภท สเปรดชีต (spreadsheet) หรือตารางคำนวณอิเล็กทรอนิกส์ที่ใช้เก็บบันทึกข้อมูลในลักษณะต่างๆ ซึ่งส่วนใหญ่มักเก็บข้อมูลประเภทการคำนวณ โดยจะ

เก็บข้อมูลลงในตารางสี่เหลี่ยมที่เรียกว่า เซล (Cell) ที่สามารถนำเอาเซลมาอ้างอิงใส่ในสูตร เพื่อให้โปรแกรมคำนวณหาผลลัพธ์จากข้อมูลที่บันทึกไว้ได้ และนอกจากนี้โปรแกรมไมโครซอฟท์เอกซ์เซล ยังมีแมโครที่ทำงานได้เฉพาะอีกด้วย โดยเมื่อเรียกใช้โปรแกรมไมโครซอฟท์เอกซ์เซลในโปรแกรมแมโครนี้ ผู้ใช้จะเป็นผู้เขียนคำสั่งขึ้นเอง เพื่อสั่งให้ประมวลผลตามที่ผู้ใช้ต้องการ ซึ่งการสร้างแมโครสามารถทำได้โดยการบันทึก (Record Macro) การกระทำที่ทำการบันทึกเอาไว้ เพื่อสามารถเรียกใช้ได้ในภายหลัง โดยจะเก็บเป็นโปรแกรมด้วยภาษา Visual Basic หรือที่เรียกว่า Visual Basic for Application (VBA) [14]

ดังนั้น งานวิจัยนี้จึงได้ประยุกต์ใช้แมโครโปรแกรม และ VBA (Visual Basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลร่วมกับโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนีย เนื่องจากง่ายต่อการใช้งาน ประหยัดเวลาและงบประมาณในการศึกษาการทำ การทดลอง ซึ่งการออกแบบโปรแกรมสำหรับการหาสภาวะที่เหมาะสมของการสลายตัวของแอมโมเนียมีตัวแปรที่ใช้ในการศึกษา ดังนี้ อุณหภูมิช่วง 900 ถึง 950 เคลวิน ความดันช่วง 4 ถึง 5 บาร์ และปริมาตรของถังปฏิกรณ์ช่วง 50 ถึง 100 ลูกบาศก์เมตร โดยระบบที่ใช้ในการออกแบบอยู่ภายใต้สภาวะไม่คงที่ และใช้เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (CSTR) สำหรับเป็นแนวทางในการพัฒนาเพื่อลดแอมโมเนียในชั้นบรรยากาศ

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1.2.1 ศึกษาการหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอน ในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล (Multiple Reaction Optimization in CSTR Reactor by Macro program in Microsoft Excel)

1.2.2 เพื่อศึกษาและเรียนรู้ขั้นตอนและกระบวนการการเขียนโปรแกรมด้วยแมโคร และ VBA (Visual basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

1.2.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนีย ผ่านการออกแบบการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

1.3 ขอบเขตงานวิจัย

1.3.1 หาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอน ในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล สำหรับปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนียร่วมกับโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) โดยมีปัจจัยในการศึกษา ดังนี้

ตัวแปรต้น : อุณหภูมิช่วง 900 เคลวิน ถึง 950 เคลวิน

ความดันช่วง 4 บาร์ ถึง 5 บาร์

ปริมาตรของถังปฏิกรณ์ช่วง 50 ถึง 100 ลูกบาศก์เมตร

ตัวแปรตาม : การแปลงผัน (Conversion)

ตัวแปรควบคุม : อัตราการไหลโดยโมลของสารเข้าถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (CSTR)

1.4 สถานที่ในการดำเนินงานวิจัย

ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

1.5 ระยะเวลาในการดำเนินงานวิจัย

กันยายน 2561 ถึง พฤษภาคม 2562

1.7 ผลที่คาดว่าจะได้รับ

1.7.1 สามารถใช้โปรแกรมแมโคร และ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล แทนการทดลองได้

1.7.2 ได้เสริมทักษะความรู้การเขียนโปรแกรมแมโคร และ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

1.7.3 เพื่อเป็นแนวทางในการศึกษาหาข้อมูล และการนำไปใช้ประโยชน์ สำหรับผู้ที่สนใจโปรแกรมแมโคร และ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล



บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.1 สมบัติทางเคมีและกายภาพของแอมโมเนีย

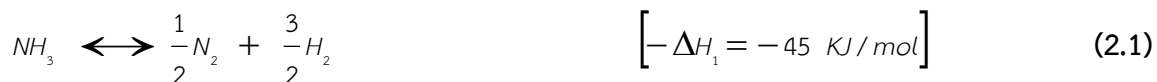
แอมโมเนียเป็นก๊าซที่เกิดขึ้นเองตามธรรมชาติและเป็นส่วนหนึ่งของวัฏจักรไนโตรเจน (nitrogen cycle) ที่อุณหภูมิและความดันปกติแอมโมเนียจะมีสถานะเป็นก๊าซไม่มีสี มีกลิ่นฉุนรุนแรงซึ่งทำให้เกิดการระคายเคืองได้ แต่ถ้าอยู่ภายใต้ความดันและอุณหภูมิเย็น จะมีสถานะเป็นของเหลว แอมโมเนียมีน้ำหนักโมเลกุลเท่ากับ 17.03 มีความถ่วงจำเพาะที่อุณหภูมิ 25 องศาเซลเซียส เท่ากับ 0.7 [1] จุดเดือด -33.4 องศาเซลเซียส มีความดันไอ 6,460 มิลลิเมตรปรอทที่อุณหภูมิ 20 องศาเซลเซียส ก๊าซแอมโมเนียสามารถละลายน้ำได้ดี มีจุดติดไฟที่อุณหภูมิ 648.89 องศาเซลเซียส

แอมโมเนียจะเสถียรที่อุณหภูมิปกติ แต่จะสลายตัวให้ไนโตรเจนและไฮโดรเจนที่อุณหภูมิสูงและความดันบรรยากาศปกติ การสลายตัวเริ่มต้นที่อุณหภูมิ 450-500 องศาเซลเซียส [2]

2.2 การสลายตัวแอมโมเนีย

การสลายตัวของแอมโมเนียเป็นกระบวนการแยกตัวของก๊าซแอมโมเนีย (NH_3) ในส่วนผสมของไฮโดรเจน (H_2) และไนโตรเจน (N_2) ตามปฏิกิริยา : $2\text{NH}_3 \rightleftharpoons \text{N}_2 + 3\text{H}_2$ ปฏิกิริยาเป็น endothermic[3]

2.3 Rate expressions [4]



$$R_1 = k_1 \left[\left(\frac{P_{NH_3}^2}{P_{H_2}^3} \right)^\alpha - K_1^2 P_{N_2} \left(\frac{P_{H_2}^3}{P_{NH_3}^2} \right)^{-\alpha} \right] \quad \text{kgmol/m}^3 \text{ s} \quad (2.5)$$

Where $\alpha = 0.674$

$$R_2 = \frac{k_2}{P_{H_2}^{2.5}} \left(\frac{P_{H_2}^3 P_{CO}}{K_2} - P_{CH_4} P_{H_2O} \right) / DEN^2 \quad \text{kgmol/kgs} \quad (2.6)$$

$$R_3 = \frac{k_3}{P_{H_2}} \left(\frac{P_{H_2} P_{CO_2}}{K_3} - P_{CO} P_{H_2O} \right) / DEN^2 \quad \text{kgmol/kgs} \quad (2.7)$$

$$R_4 = \frac{k_4}{P_{H_2}^{3.5}} \left(\frac{P_{H_2}^4 P_{CO_2}}{K_4} - P_{CH_4} P_{H_2O}^2 \right) / DEN^2 \quad \text{kgmol/kgs} \quad (2.8)$$

Where : $DEN = 1 + K_{CO} P_{CO} + K_{H_2} P_{H_2} + K_{CH_4} P_{CH_4} + K_{H_2O} P_{H_2O} / P_{H_2}$

2.4 Rate coefficients [4]

$$k_1 = 5.744 \times 10^{16} \exp\left(-\frac{277.23}{T}\right) \quad \frac{\text{kgmol}}{\text{m}^3 \text{ sPa}^{-0.674}} \quad (2.9)$$

$$k_1 = 8.336 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{28879.0}{T}\right) \quad \frac{\text{kgmol Pa}^{0.5}}{\text{kg s}} \quad (2.10)$$

$$k_1 = 1.219 \times 10^2 \exp\left(-\frac{8074.3}{T}\right) \quad \frac{\text{kgmol Pa}^{-1}}{\text{kg s}} \quad (2.11)$$

$$k_1 = 2.012 \times 10^{14} \exp\left(-\frac{29336.0}{T}\right) \quad \frac{\text{kgmol Pa}^{0.5}}{\text{kg s}} \quad (2.12)$$

2.5 Adsorption equilibrium constants [4]

$$K_{\text{CH}_4} = 6.65 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{4604.28}{T}\right) \quad \text{Pa}^{-1} \quad (2.13)$$

$$K_{\text{H}_2\text{O}} = 1.77 \times 10^2 \exp\left(-\frac{10666.35}{T}\right) \quad \text{Pa}^{-1} \quad (2.14)$$

$$K_{\text{H}_2} = 6.12 \times 10^{-14} \exp\left(\frac{9971.13}{T}\right) \quad \text{Pa}^{-1} \quad (2.15)$$

$$K_{\text{CO}} = 8.23 \times 10^{-10} \exp\left(\frac{8497.71}{T}\right) \quad \text{Pa}^{-1} \quad (2.16)$$

2.6 Equilibrium constants [4]

$$\log K_1 = -5.89117 + \frac{2250.322}{T} - 1.51049 \log T - 25.898 \times 10^{-5} T \quad \text{Pa}^{-1} \quad (2.17)$$

$$K_2 = 10266.76 \times 10^6 \exp\left(-\frac{26830.0}{T} + 30.11\right) \quad \text{Pa}^2 \quad (2.18)$$

$$K_3 = \exp\left(\frac{4400.0}{T} - 4.063\right) \quad (2.19)$$

$$K_4 = K_2 K_3 \quad \text{Pa}^2 \quad (2.20)$$

2.7 สมมติฐานของแบบจำลอง

- 2.7.1 ใช้ถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (CSTR)
- 2.7.2 อัตราการไหลโดยโมลของสารเข้าถังปฏิกรณ์ (F_{A0}) คงที่
- 2.7.3 สถานะการดำเนินการไม่ขึ้นกับเวลา (Unsteady State)
- 2.7.4 สารตั้งต้นที่ใช้อยู่ในสถานะแก๊ส

2.8 ปัจจัยที่มีผลต่อกระบวนการสลายตัวของปฏิกิริยาเอมโมเนีย

2.8.1 นิยามของอัตราเร็วปฏิกิริยา (Definition of the rate of reaction, $-r_A$)

ปฏิกิริยา (Chemical Reaction) คือ กระบวนการที่สารเคมีเกิดการเปลี่ยนแปลงคุณลักษณะไปเป็นสารประกอบหรือโมเลกุลชนิดใหม่ที่เปลี่ยนไปจากเดิม การเกิดปฏิกิริยาเคมีจำเป็นต้องมีสารเคมีตั้งต้นไปเป็นสารประกอบหรือโมเลกุลชนิดใหม่ที่เปลี่ยนไปจากเดิม การเกิดปฏิกิริยาเคมีจำเป็นต้องมีสารเคมีตั้งต้นตั้งแต่ 2 ตัวขึ้นไป (เรียกสารเคมีตั้งต้นเหล่านี้ว่า “สารตั้งต้น” หรือ “Reactants”) ทำปฏิกิริยาต่อกันและทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงคุณสมบัติทางเคมี ซึ่งก่อตัวขึ้นมาเป็นสารใหม่ที่เรียกว่า “ผลิตภัณฑ์” (Products)

อัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยา (Rate of chemical reaction) สามารถอธิบายได้ในหลายรูปแบบ เช่น ในรูปแบบของอัตราการหายไปของสารตั้งต้น หรือในรูปแบบของอัตราการเกิดขึ้นของผลิตภัณฑ์ เช่น



ซึ่งปฏิกิริยาดังกล่าวมีสารตั้งต้น คือ สาร A และสาร B ได้ผลิตภัณฑ์คือ สาร C และสาร D ซึ่งอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาสามารถอธิบายในเทอมของอัตราการหายไปของสาร A สามารถเขียนได้เป็น $-r_A$ ซึ่งแสดงถึงอัตราการลดลงของสาร A เมื่อปฏิกิริยาดำเนินไป โดยที่อัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาถูกนิยามว่า จำนวนโมลของสาร A ที่หายไปจากการทำปฏิกิริยาต่อหน่วยเวลา ต่อหน่วยปริมาตรของสารผสมในปฏิกิริยา (โมลต่อลูกบาศก์เดซิเมตรต่อเวลา, $\text{mol/dm}^3 \text{ s}$)

$$r = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt}$$

$$r = \frac{dC_A}{dt}$$

N_A = จำนวนโมลของสารที่เปลี่ยนแปลง (mol)

C_A = ความเข้มข้นของสารที่เปลี่ยนแปลง (mol/L)

V = ปริมาตรของไหล (cm^3)

r = อัตราเร็วในการเกิดปฏิกิริยา (mol/L/s)

t = เวลา (s)

ถ้าปฏิกิริยาเคมีที่ซับซ้อนขึ้น เช่น



อัตราเร็วของการเกิดผลิตภัณฑ์ของสาร C จะมีค่าเป็น 3 เท่าของอัตราการใช้ไปของสารตั้งต้น A ถ้าพิจารณาสมการจะได้ความสัมพันธ์ของอัตราเร็วของปฏิกิริยาดังสมการที่ 2.21 [5]

$$r = -\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{2} \frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{3} \frac{dC_C}{dt} = \frac{dC_D}{dt} \quad (2.21)$$

2.8.2 กฎอัตรา (Rate law)

กฎอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาเป็นสมการแสดงความสัมพันธ์ของอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยากับค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งเรียกว่า Rate constant หรือ k นั้นเอง และค่าความเข้มข้นของสารต่างๆที่เกี่ยวข้องในการเกิดปฏิกิริยา โดยทั่วไปแล้วอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาจะขึ้นกับความเข้มข้นของสารที่เกี่ยวข้องในการเกิดปฏิกิริยา จากกฎของ Mole Balance ของสารแต่ละตัวที่เข้าทำปฏิกิริยา กล่าวคืออัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาจะแปรผันโดยตรงกับความเข้มข้นของสารที่ทำปฏิกิริยาซึ่งหมายถึง อัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาเป็นสัดส่วนโดยตรงกับผลคูณของความเข้มข้นสารตั้งต้นยกกำลังอันดับของปฏิกิริยา หรือที่เรียกว่า Reaction order ดังสมการที่ 2.22

$$\text{Rate} = k[A]^m[B]^n \quad (2.22)$$

เมื่อ [A] คือ ความเข้มข้นของสารตั้งต้น A

[B] คือ ความเข้มข้นของสารตั้งต้น B

k คือ ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา (Rate constant)

m คือ อันดับของการเกิดปฏิกิริยาของสารตั้งต้น A

n คือ อันดับของการเกิดปฏิกิริยาของสารตั้งต้น B

เพื่อศึกษาว่าสารใดบ้างมีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาและมีผลมากน้อยอย่างไร จึงยกตัวอย่างสมการแสดงความสัมพันธ์ให้เห็นได้ชัดเจนขึ้นดังสมการความสัมพันธ์ดังนี้



โดยสมการดังกล่าวจะหมายถึงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร A และสาร B (สารตั้งต้น) เพื่อเกิดเป็นสาร C และสาร D (ผลิตภัณฑ์) นอกจากนี้อัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาของสารที่เกี่ยวข้องในปฏิกิริยาสามารถเขียนให้อยู่ในรูปความเข้มข้นของสารตั้งต้นเพียงอย่างเดียว ดังแสดงสมการกฎอัตราของปฏิกิริยาได้ดังนี้

$$-r_A = k_A C_A^m C_B^n$$

$$-r_B = k_B C_B^m C_A^n$$

$$r_C = k_C C_A^m C_B^n$$

$$r_D = k_D C_A^m C_B^n$$

และเนื่องจากในปฏิกิริยาเดียวกันกฎอัตราย่อมเท่ากัน ดังนั้นจะพบว่า

$$-r_A = -r_B = r_C = r_D$$

ถ้า k เท่ากันแล้ว

$$\frac{-r_A}{a} = \frac{-r_B}{b} = \frac{r_C}{c} = \frac{r_D}{d} \quad (2.23)$$

จากสมการ 2.23 ค่า k หรือค่าคงที่ปฏิกิริยา (Rate constant) เป็นค่าคงที่สำหรับปฏิกิริยาหนึ่งๆ ที่อุณหภูมิเท่ากันนั้น ไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของสารตั้งต้นแต่ขึ้นกับอุณหภูมิที่เปลี่ยนแปลงไป ถ้าพบว่าในปฏิกิริยาอุณหภูมิเปลี่ยนแปลงไปค่าปฏิกิริยาจะเปลี่ยนแปลงด้วยเลขชี้กำลัง n และ m เป็นอันดับของปฏิกิริยาที่เกี่ยวข้องกับสาร A และสาร B ตามลำดับ ซึ่งหาได้จากการวิเคราะห์ข้อมูลจากการทดลองเท่านั้น และเมื่อนำเลขชี้กำลัง n รวมกับ B จะได้อันดับของปฏิกิริยารวม (Overall order reaction) ซึ่งมีประโยชน์ในการเขียนสมการกฏอัตราเพื่อศึกษากลไกการเกิดปฏิกิริยา นอกจากนี้ยังสามารถนำมาใช้เพื่อแบ่งประเภทของปฏิกิริยาได้ดังนี้

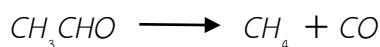
ปฏิกิริยาอันดับศูนย์ (n=0) $-r_A = k$; $k = \frac{\text{mol}}{\text{dm}^3 / \text{s}}$

ปฏิกิริยาอันดับศูนย์ (Zero-order reaction) เป็นปฏิกิริยาที่มีอันดับของปฏิกิริยารวมเท่ากับ 0 ซึ่งแสดงว่า อัตราปฏิกิริยาไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของสารตั้งต้น

ปฏิกิริยาอันดับหนึ่ง (n=1) : $-r_A = kC_A$; $k = \text{s}^{-1}$

ปฏิกิริยาอันดับหนึ่ง (n=2) : $-r_A = kC_A^2$; $k = \frac{\text{dm}^3}{\text{mol} / \text{s}}$

ปฏิกิริยาอันดับหนึ่ง (First-order reaction) เป็นปฏิกิริยาที่มีอันดับของปฏิกิริยารวมเท่ากับ 1 และปฏิกิริยาอันดับสอง (Second-order reaction) เป็นปฏิกิริยาที่มีอันดับของปฏิกิริยารวมเท่ากับ 2 หมายความว่า อัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของสารตั้งต้น นอกจากนี้อันดับรวมของปฏิกิริยาสามารถเป็นเลขเศษส่วนได้ เนื่องจากบางครั้งสมการการเกิดปฏิกิริยาไม่ได้อยู่ในรูปแบบง่าย ตัวอย่างเช่น ปฏิกิริยาการแตกตัวของอะเซทัลดีไฮด์ (Acetaldehyde)



อัตราเร็วปฏิกิริยาคือ

$$r = k[\text{CH}_3\text{CHO}]^{\frac{1}{2}}$$

การแสดงสมการอัตราเร็วปฏิกิริยาที่ถูกต้องนั้นจำเป็นต้องเข้าใจกลไกของปฏิกิริยาและการหาอัตราเร็วของปฏิกิริยานั้นจำเป็นต้องทราบค่าคงที่ปฏิกิริยาและตัวแปรที่ใช้ในการคำนวณซึ่งอธิบายความสัมพันธ์และวิธีการคำนวณดังนี้ [5]

2.8.3 ค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา (Reaction rate constant)

จากที่กล่าวข้างต้นอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาเป็นสัดส่วนกับความเข้มข้นของสารตั้งต้นและแปรผันตามค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยา จึงทำให้ค่าคงที่เป็นตัวแปรที่สำคัญต่อการวิเคราะห์อัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยา โดยค่าคงที่สำหรับปฏิกิริยาหนึ่งๆ จะขึ้นอยู่กับพลังงานก่อกัมมันต์ หรือที่เรียกว่า Activation Energy กับ อุณหภูมิหนึ่งเท่านั้นโดยไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของสารตั้งต้น ถ้าพบว่ามีปฏิกิริยานั้นมีอุณหภูมิเปลี่ยนแปลงไปค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาก็จะเปลี่ยนไปด้วย ซึ่งค่าคงที่ของการเกิดปฏิกิริยาสามารถหาได้จากการทดลองเท่านั้น โดยทำการทดลองหาค่าอันดับของการเกิดปฏิกิริยาและอัตราเร็วของการเกิดปฏิกิริยาที่อุณหภูมิหนึ่งๆ จะสามารถคำนวณหาค่าคงที่ของปฏิกิริยาได้จากสมการที่ 2.24 [5]

$$k = \frac{\text{rate}}{[A]^m [B]^n} \quad (2.24)$$

2.8.4 ค่าพลังงานก่อกัมมันต์ (Activation energy, Ea)

ในการเกิดปฏิกิริยาเคมีมีการเคลื่อนย้ายอะตอมจากโมเลกุลหนึ่งไปยังอีกโมเลกุลหนึ่ง ซึ่งจะต้องมีการสัมผัสหรือการชนกันของโมเลกุลของสารเริ่มต้น ถ้าโมเลกุลชนกันด้วยความถี่ที่มากขึ้นปฏิกิริยาก็จะเกิดได้เร็วขึ้นด้วย นอกจากนี้การเกิดปฏิกิริยายังเกี่ยวข้องกับการสลายพันธะเดิมและการเกิดพันธะใหม่ ทั้งสองขั้นตอนนี้เกี่ยวข้องกับพลังงานที่เปลี่ยนแปลงไป โดยพลังงานจะต้องเพียงพอที่จะทำให้เกิดปฏิกิริยาและพลังงานอย่างน้อยที่สุดที่ต้องใช้เพื่อให้เกิดปฏิกิริยาเรียกว่า “พลังงานก่อกัมมันต์” หรือ “Activation energy, Ea”

อีกปัจจัยหนึ่งที่มีความสำคัญต่อการเกิดปฏิกิริยาก็คือ พลังงานของโมเลกุลที่เคลื่อนที่เข้าชนกันหรือพลังงานจลน์ (Kinetic Energy) ของโมเลกุลนั่นเอง ทุกโมเลกุลมีพลังงานจลน์ที่ต่างกันถึงแม้จะอยู่ที่อุณหภูมิเดียวกันก็ตาม พลังงานจลน์ของโมเลกุลนี้เองที่ถูกแปรไปใช้ทำให้ปฏิกิริยาเริ่มต้นเกิดขึ้นได้ โดยที่อุณหภูมิสูงขึ้นจะมีจำนวนโมเลกุลที่มีพลังงานสูงพอสำหรับการเกิดปฏิกิริยามากขึ้น [5]

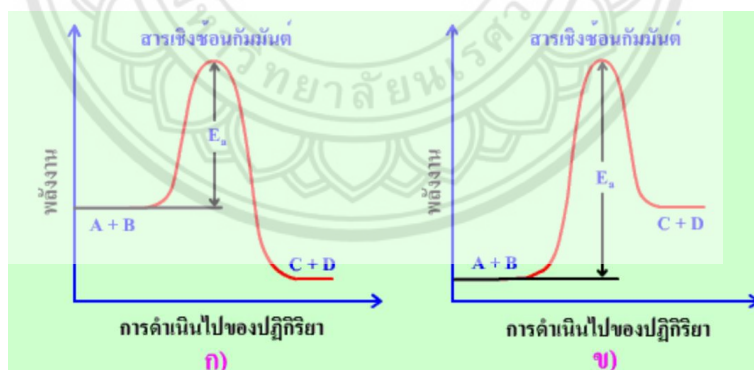
2.8.4.1 ลักษณะสำคัญของพลังงานก่อกัมมันต์

- ก. ปฏิกิริยาเคมีที่ต่างชนิดกัน พลังงานก่อกัมมันต์ต่างกัน
- ข. ปฏิกิริยาที่มีพลังงานก่อกัมมันต์ต่ำ ปฏิกิริยาจะเกิดง่ายหรือเร็วกว่าปฏิกิริยาที่มีพลังงานก่อกัมมันต์สูง
- ค. พลังงานก่อกัมมันต์ไม่เกี่ยวข้องกับอัตราการเกิดปฏิกิริยา คือ ปฏิกิริยาที่มีพลังงานก่อกัมมันต์ต่ำปฏิกิริยานั้นอาจจะมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาเร็วหรือสูงก็ได้
- ง. พลังงานก่อกัมมันต์ไม่เกี่ยวข้องกับพลังงานของปฏิกิริยา [6]

2.8.5 การเปลี่ยนแปลงพลังงานของสารในระหว่างการดำเนินไปของปฏิกิริยา มี 2 แบบ คือ

2.8.5.1 ปฏิกิริยาคายความร้อน (Exothermic reaction) คือ ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นแล้วให้พลังงานความร้อนออกมา ทำให้สิ่งแวดล้อมมีอุณหภูมิสูงขึ้น แต่อุณหภูมิของสารลดลง

2.8.5.2 ปฏิกิริยาดูดความร้อน (Endothermic reaction) คือ ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นแล้วดูดความร้อนจากสิ่งแวดล้อมเข้าไปทำให้อุณหภูมิสูงขึ้นแต่สิ่งแวดล้อมอุณหภูมิลดลง [7]



รูปที่ 2.1 การเปลี่ยนแปลงพลังงานสำหรับ ก. ปฏิกิริยาคายความร้อน ข. ปฏิกิริยาดูดความร้อน
 ที่มา: https://il.mahidol.ac.th/e-media/ap-chemistry2/kinetics/collision_theory.htm

ก. ถ้าสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นมีพลังงานต่ำกว่าสารตั้งต้น (สารผลิตภัณฑ์เสถียรกว่าสารตั้งต้น) ในขณะเกิดปฏิกิริยาก็จะมีการคายความร้อนควบคู่ไปด้วย เรียกปฏิกิริยาชนิดนี้ว่า ปฏิกิริยาคายความร้อน (Exothermic reaction)

ข. ถ้าสารผลิตภัณฑ์ที่เกิดขึ้นมีพลังงานมากกว่าสารตั้งต้น (สารผลิตภัณฑ์เสถียรน้อยกว่าสารตั้งต้น) ในขณะเกิดปฏิกิริยาก็จะมีการดูดความร้อนควบคู่ไปด้วย เรียกปฏิกิริยาชนิดนี้ว่า ปฏิกิริยาดูดความร้อน (Endothermic reaction) [8]

2.8.6 การหาค่าพลังงานก่อกัมมันต์

เนื่องจากอุณหภูมิมิผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา กล่าวคือเมื่ออุณหภูมิสูงขึ้นเป็นผลให้โมเลกุลของสารตั้งต้นเคลื่อนที่ได้เร็วจึงเพิ่มโอกาสในการชนกันมากขึ้นเช่นกัน และการชนทำให้โมเลกุลของสารตั้งต้นมีพลังงานจลน์สูงกว่าพลังงานก่อกัมมันต์จึงทำให้ปฏิกิริยาเคมีดำเนินไปจนก่อให้เกิดเป็นผลิตภัณฑ์ ดังนั้นค่าคงที่ปฏิกิริยาสำหรับปฏิกิริยามูลฐานสามารถแสดงความสัมพันธ์ได้ดังสมการอาร์เรเนียส (Arrhenius equation) สมการที่ 2.25

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (2.25)$$

โดยที่ A คือ แฟกเตอร์ความถี่

E_a คือ พลังงานก่อกัมมันต์ (J-mol)

R คือ ค่าคงที่ของก๊าซอุดมคติ (Gas constant = 8.314 J/molK)

T คือ อุณหภูมิ (K)

จากสมการอัตราเร็วโดยทั่วไป

$$-r_A = \frac{-dC_A}{dt} = k_A C_A^m C_B^n$$

เมื่อแทนค่า k จากสมการอาร์เรเนียสลงในสมการจะได้

$$-r_A = \frac{-dC_A}{dt} = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} C_A^m C_B^n$$

ดังนั้นเมื่อต้องการทราบอัตราเร็วของปฏิกิริยาจำเป็นต้องรู้ความเข้มข้นของสารที่เกี่ยวข้องในปฏิกิริยา อุณหภูมิที่ใช้และค่าคงที่ปฏิกิริยาที่ได้จากการทดลองจะทำให้สามารถหาค่าพลังงานก่อกัมมันต์และค่าแฟกเตอร์ความถี่ได้โดยการเปลี่ยนรูปสมการอาร์เรเนียสให้อยู่ในรูปสมการเชิงเส้น ดังสมการที่ 2.26 [5]

$$\ln k = \ln A - \frac{E_a}{RT} \quad (2.26)$$

2.8.7 ปัจจัยที่มีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา

2.8.7.1 ธรรมชาติของสารตั้งต้น (Natural property of reactant)

สารแต่ละชนิดมีความว่องไวในการทำปฏิกิริยาเคมีไม่เท่ากัน การเปลี่ยนชนิดของสารที่เข้าทำปฏิกิริยาจะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเปลี่ยนไป [9]

2.8.7.2 ความเข้มข้นของสารตั้งต้น (Concentration of reaction)

ปฏิกิริยาส่วนใหญ่อัตราการเกิดปฏิกิริยาขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่เข้าทำปฏิกิริยา สำหรับปฏิกิริยาที่มีสารตั้งต้นมากกว่าหนึ่งชนิด อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีอาจขึ้นอยู่กับความเข้มข้นของสารตั้งต้นสารใดสารหนึ่ง หรือทุกสาร หรือไม่ขึ้นกับความเข้มข้นของทุกสารก็ได้

การที่ความเข้มข้นของสารตั้งต้นมีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยาสามารถใช้ทฤษฎีการชนอธิบายได้ว่า เมื่อความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่เข้าทำปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น ทำให้จำนวนอนุภาคเพิ่มขึ้นโอกาสที่อนุภาคของสารตั้งต้นชนกันก็มีมากขึ้น และเมื่ออนุภาคเพิ่มขึ้นจำนวนอนุภาคที่มีพลังงานสูงก็เพิ่มมากขึ้นด้วยโอกาสที่อนุภาคของสารชนกันแล้วเกิดปฏิกิริยาได้ก็มากขึ้น ดังนั้นเมื่อเพิ่มความเข้มข้นของสารตั้งต้นปฏิกิริยาเคมีจึงเกิดเร็วขึ้น ในทางตรงกันข้ามถ้าลดความเข้มข้นของสารตั้งต้นปฏิกิริยาเคมีก็จะเกิดช้าลง [9]

2.8.7.3 พื้นที่ผิวสัมผัสของสารตั้งต้น (Surface area of reactant)

อัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมีจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับพื้นที่ผิวที่เกิดปฏิกิริยา ถ้าพื้นที่ผิวมาก อัตราการเกิดปฏิกิริยาก็จะมากเช่นเดียวกัน ในทางตรงกันข้าม ถ้าพื้นที่ผิวน้อยก็จะทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาน้อยเช่นกัน [10]

2.8.7.4 ความดัน (Pressure)

ปฏิกิริยาเคมีที่สารตั้งต้นอย่างน้อย 1 สาร อยู่ในสถานะก๊าซ การเปลี่ยนแปลงความดันของก๊าซโดยการเปลี่ยนแปลงปริมาตร จะมีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา การเพิ่มความดันโดยการลดปริมาตรของก๊าซ นอกจากความดันของก๊าซจะเพิ่มขึ้นแล้ว ความเข้มข้นของสารตั้งต้นที่อยู่ในสถานะก๊าซเพิ่มขึ้นด้วยเพราะโมเลกุลของก๊าซมาอยู่ชิดกันมาก จึงทำให้อุณหภูมิของก๊าซชนกันมากขึ้นมีผลทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาเร็วขึ้น แต่การเพิ่มปริมาตรของก๊าซมีผลทำให้ความดันของก๊าซลดลง ความเข้มข้นของสารตั้งต้นในสถานะก๊าซลดลงด้วย เพราะโมเลกุลของก๊าซอยู่ห่างกัน ทำให้อุณหภูมิของก๊าซชนกันน้อยลงจึงมีผลทำให้อัตราการเกิดปฏิกิริยาช้าลง [9]

2.8.8 อุณหภูมิ (Temperature)

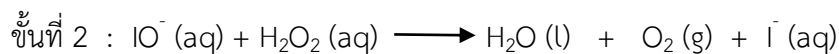
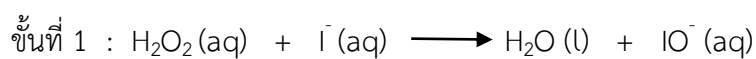
ปฏิกิริยาโดยทั่วไปจะมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นเมื่อเพิ่มอุณหภูมิ และอัตราการเกิดปฏิกิริยาจะลดลงเมื่อลดอุณหภูมิ ที่เป็นเช่นนี้เพราะเมื่อเพิ่มอุณหภูมิความเร็วเฉลี่ยของโมเลกุลของก๊าซจะเพิ่มขึ้น ทำให้โมเลกุลที่มีพลังงานจลน์สูงขึ้น ดังนั้นอุณหภูมิของสารตั้งต้นจึงเคลื่อนที่เร็วขึ้นมีโอกาสที่อุณหภูมิชนกันมากขึ้น [9]

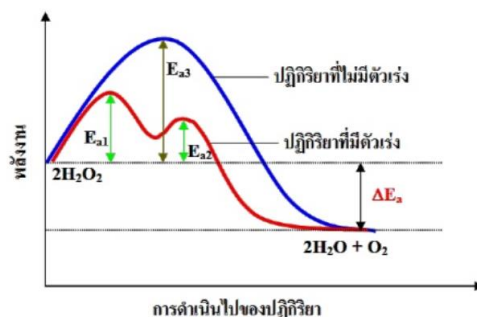
2.8.9 ตัวเร่งปฏิกิริยา

ตัวเร่งปฏิกิริยา (Catalyst) คือสารที่เปลี่ยนความเร็วของปฏิกิริยาโดยตัวเร่งปฏิกิริยาจะไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงทางเคมีอย่างถาวรในปฏิกิริยาเมื่อสิ้นสุดปฏิกิริยา ตัวเร่งปฏิกิริยาโดยทั่วไปแบ่งออกเป็น 2 ประเภท คือ

2.8.9.1 ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อเดียว (Homogeneous catalyst)

ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อเดียว หรือตัวเร่งปฏิกิริยาเอกพันธ์ หมายถึง ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีวัฏภาคเหมือนกับสารตั้งต้น เช่น การใช้ $I^- (aq)$ เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาการสลายตัวของ $H_2O_2 (aq)$ เมื่อไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยา กลไกของปฏิกิริยามีขั้นตอนเดียว ดังนี้ $2H_2O_2 (aq) \longrightarrow 2H_2O (l) + O_2 (g)$ เมื่อมี $I^- (aq)$ เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา กลไกของปฏิกิริยาเกิดขึ้น 2 ขั้นตอน





รูปที่ 2.2 กราฟแสดงการดำเนินไปของปฏิกิริยาที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาและไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยา
สำหรับปฏิกิริยา $2\text{H}_2\text{O}_2(\text{aq}) \longrightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{O}_2(\text{g})$

ที่มา : <https://www.slideshare.net/siricom4/5-56039793>

จากกราฟรูปที่ 2.2 E_{a1} คือพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาขั้นที่ 1, E_{a2} คือพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาขั้นที่ 2, E_{a3} คือพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาที่ไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยา และ E_a คือพลังงานของปฏิกิริยา

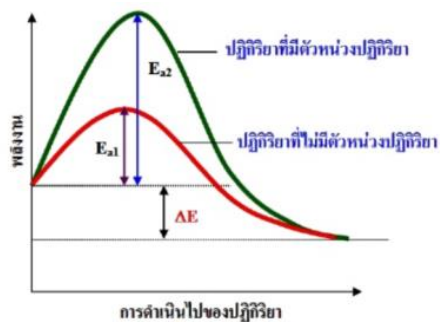
2.8.9.2 ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อผสม

ตัวเร่งปฏิกิริยาเนื้อผสม หรือตัวเร่งปฏิกิริยาวิวิธภณท์ (Heterogeneous catalyst) หมายถึง ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีวัฏภาคต่างจากสารตั้งต้น ซึ่งมักเป็นของแข็งกับโลหะ ปฏิกิริยาวิวิธภณท์จะเกิดที่ผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาจึงมักจะบดตัวเร่งปฏิกิริยาให้ละเอียดเพื่อให้พื้นที่ผิวในการทำปฏิกิริยามากที่สุด การที่ตัวเร่งปฏิกิริยาช่วยทำให้ปฏิกิริยาเกิดเร็วขึ้นเนื่องจากตัวเร่งปฏิกิริยาไปช่วยทำให้พลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาลดลง การลดพลังงานก่อกัมมันต์ทำให้ปฏิกิริยาเกิดได้ง่ายและเร็วขึ้น เนื่องจากเมื่อพลังงานก่อกัมมันต์ลดลงมีผลทำให้จำนวนโมเลกุลที่มีพลังงานสูงพอมีจำนวนมากขึ้นทำให้การชนที่มีประสิทธิภาพเพิ่มมากขึ้นปฏิกิริยาเคมีจึงเกิดได้เร็วขึ้น [9]

2.8.10 ตัวหน่วงปฏิกิริยา

ตัวหน่วงปฏิกิริยาหรือตัวยับยั้งปฏิกิริยา (Inhibitor) หมายถึง สารที่เติมลงไปในการเกิดปฏิกิริยาแล้วทำให้ปฏิกิริยาเคมีนั้นเกิดช้าลง ซึ่งตัวหน่วงปฏิกิริยาอาจมีส่วนร่วมในการเกิดปฏิกิริยาแล้วเปลี่ยนเป็นสารใหม่ หรืออาจจะไปขัดขวางการทำหน้าที่ของตัวเร่งปฏิกิริยาก็ได้ เช่น ปฏิกิริยาการสลายตัวของไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์ (H_2O_2) ได้น้ำและก๊าซออกซิเจน ดังสมการ

$2\text{H}_2\text{O}_2(\text{l}) \longrightarrow 2\text{H}_2\text{O}(\text{l}) + \text{O}_2(\text{g})$ ปฏิกิริยานี้ถ้าเติมกรดไฮโดรคลอริกเจือจาง หรือเติมกลีเซอรอลลงไปเล็กน้อยจะทำให้ไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์สลายตัวได้ช้าลง



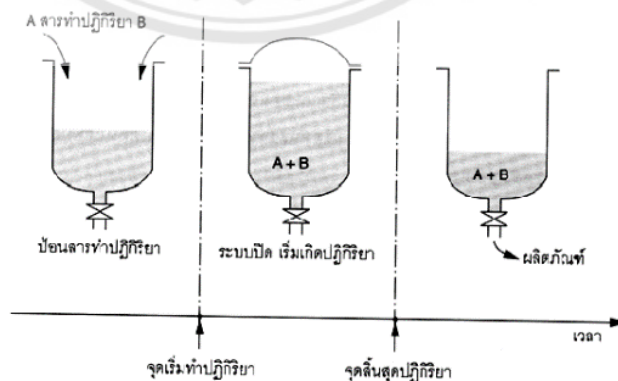
รูปที่ 2.3 แสดงพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยาที่มีตัวเร่งและไม่มีตัวเร่งปฏิกิริยา

ที่มา : <https://www.slideshare.net/siricom4/5-56039793>

ตัวเร่งปฏิกิริยาช่วยทำให้ปฏิกิริยาเคมีเกิดช้าลง เนื่องจากตัวเร่งปฏิกิริยาไปเพิ่มพลังงานก่อกัมมันต์ของปฏิกิริยา ($E_{a2} > E_{a1}$) แต่ไม่ได้ทำให้พลังงานของปฏิกิริยาเพิ่มขึ้น (ΔE) [9]

2.9 ประเภทของเครื่องปฏิกรณ์

2.9.1 เครื่องปฏิกรณ์แบบกะ (Batch reactor)



รูปที่ 2.4 การทำงานของ Batch reactor ช่วงเวลาต่างๆ

ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒน์

2.9.1.1 หลักการทำงาน

สารตั้งต้นทั้งหมดถูกป้อนเข้าไปในถังปฏิกรณ์ แล้วจึงเริ่มทำปฏิกิริยา เมื่อเสร็จสิ้นปฏิกิริยาตามเวลาที่กำหนด จึงนำของผสม (สารตั้งต้นที่เหลืออยู่และผลิตภัณฑ์) ออกจากถังปฏิกรณ์

2.9.1.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม

- ก. มีโครงสร้างง่าย ๆ
- ข. กำลังการผลิตต่ำ
- ค. เหมาะกับอุตสาหกรรมขนาดเล็ก เช่น การหมัก อุตสาหกรรมผสมสี [11]

2.9.2 เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องและไหลต่อเนื่อง (Flow or Continuous)



รูปที่ 2.5 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลและแบบถังกวนในอุดมคติ

ที่มา : จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒน์

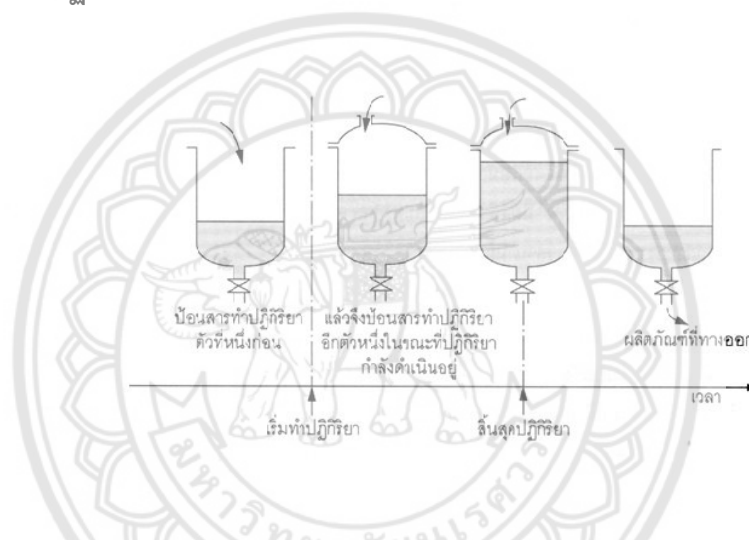
2.9.2.1 หลักการทำงาน

สารทำปฏิกิริยาป้อนเข้าที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์อย่างต่อเนื่อง และผลิตภัณฑ์ที่ได้ไหลออกมาที่ทางออก

2.9.2.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม

- ก. ได้ผลผลิตอย่างต่อเนื่อง กำลังการผลิตสูง
- ข. เหมาะกับอุตสาหกรรมขนาดใหญ่ เช่นการผลิตพลาสติก [11]

2.9.3 เครื่องปฏิกรณ์แบบเฟดแบทช์ (Fed-batch or semi-batch)



รูปที่ 2.6 การทำงานของเครื่องปฏิกรณ์แบบ Fed batch reactor ในช่วงเวลาต่างๆ

ที่มา : จดณศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

2.9.3.1 หลักการทำงาน

สารทำปฏิกิริยาตัวหนึ่งป้อนให้เข้าไปอยู่ในถังปฏิกรณ์ก่อน แล้วจึงป้อนสารทำปฏิกิริยาอีกตัวหนึ่ง เข้าไปในเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง หรือป้อนเป็นระยะๆ

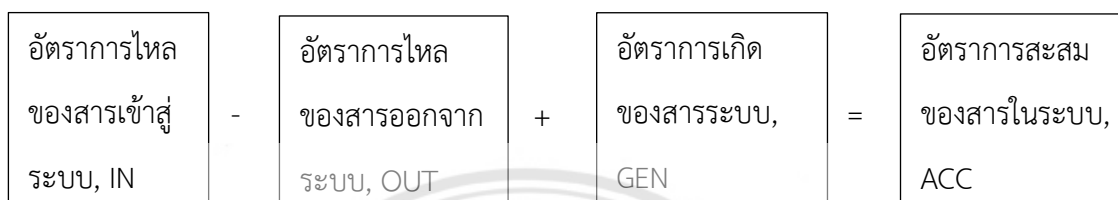
2.9.3.2 ข้อดีและการประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรม

- ก. ควบคุมอุณหภูมิของระบบได้ง่าย
- ข. รักษาความเข้มข้นของสารตั้งต้นตัวหนึ่งให้มีค่าสูงตลอดเวลาทำให้ได้ผลิตภัณฑ์

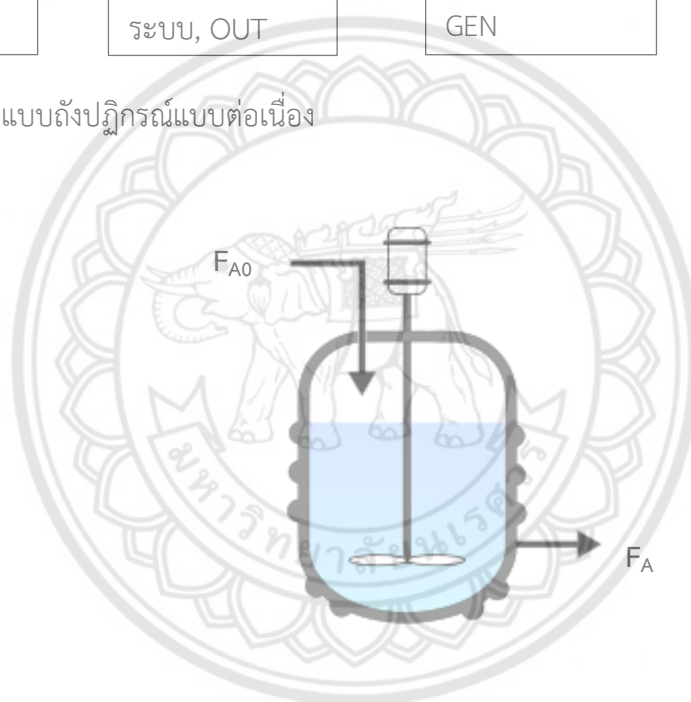
มากขึ้น [11]

2.10 สมการการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

2.10.1 สมการสมดุลโมล [12]



สมการการออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง



รูปที่ 2.7 ถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง CSTR

ที่มา : http://www.wikiwand.com/en/Continuous_stirred-tank_reactor

$$In - Out + Gen = ACCUM$$

$$F_{i0} - F_i + r_i V = \frac{dN_i}{dt}$$

$$(F_{i0} - F_i + r_i V) \Delta T = N_{i,final} - N_{i,in}$$

$$F_{i0} - F_{i0} + F_{i0} X_i + r_i v = -N_{i0} \frac{dX_i}{dt}$$

$$\left(\frac{F_{i0} X_i + r_i v}{-N_{i0}} \right) \Delta T = X_{i+1} - X_i$$

$$X_{i+1} = X_i + \left(\frac{F_{i0} X_i + r_i v}{-N_{i0}} \right) \Delta T$$

2.10.2 สมดุลพลังงานของถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (CSTR reactor) [12]



$$\frac{d\left(\sum_{i=1}^n N_i H_i\right)}{dt} = \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i + \dot{Q} - \dot{W}_s$$

$$\sum_{i=1}^n N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i \frac{dN_i}{dt} = \sum_{i=1}^n F_{i0} H_{i0} - \sum_{i=1}^n F_i H_i + \dot{Q} - \dot{W}_s$$

ค่าเอนทาลปีจากค่าความจุความร้อน

$$\Delta H_i = C_{pi} dT$$

$$H_i(T) = H_i^0(T) + \int_{T_R}^T C_{pi} dT$$

$$\text{ดังนั้น} \quad \sum_{i=1}^n N_i C_{pi} \frac{dT}{dt} + \sum_{i=1}^n H_i = \sum_{i=1}^n F_{i0} \left(H_i^0 + \int_{T_R}^{T_0} C_{pi} dT \right) - \sum_{i=1}^n F_i \left(H_i^0 + \int_{T_R}^T C_{pi} dT \right) + \dot{Q} - \dot{W}_s$$

$$\begin{aligned}
&= -\left(\sum_{i=1}^n F_i H_i^0 - \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i^0\right) - \left(\sum_{i=1}^n F_i \int_{T_R}^T C_{pi} dT - \sum_{i=1}^n F_{i0} \int_{T_R}^T C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_i \int_{T_R}^T C_{pi} dT - \sum_{i=1}^n F_{i0} \int_{T_R}^T C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_i \int_{T_R}^T C_{pi} dT - \sum_{i=1}^n F_{i0} \int_{T_R}^T C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_{i0} \left(\int_{T_R}^T C_{pi} dT - \int_{T_R}^T C_{pi} dT\right) + F_{A0} X \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_{i0} \int_{T_0}^T C_{pi} dT - F_{A0} X \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(\sum_{i=1}^n F_{A0} \Theta_i \int_{T_0}^T C_{pi} dT - F_{A0} X \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 - \left(F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}(T - T_0) + F_{A0} X \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)\right) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
&= -F_{A0} X \left[\Delta H_{Rxn}^0 + \Delta \tilde{C}_p (T - T_R)\right] - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}(T - T_0) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
\therefore \sum_{i=1}^n N_{C_{pi}} \frac{dT}{dt} &= F_{A0} X (-\Delta H_{Rxn}^0) - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}(T - T_0) + \dot{Q} - \dot{W}_s \\
\frac{dT}{dt} &= \frac{F_{A0} X (-\Delta H_{Rxn}^0) - F_{A0} \sum_{i=1}^n \Theta_i \tilde{C}(T - T_0) + \dot{Q} - \dot{W}_s}{N_{A0} \left[\sum_{i=1}^n \Theta_i C_{pi} + X \Delta C_p \right]}
\end{aligned}$$

แต่ $F_i = F_{i0} + v_i F_{A0} X$

และ $F_{i0} = F_{A0} \left(\frac{F_{i0}}{F_{A0}} \right) = F_{A0} \Theta_i$

เมื่อ $\Theta_i = \frac{F_{i0}}{F_{A0}}$

$$\begin{aligned} \text{แต่} \quad \sum_{i=1}^n F_i H_i^0 - \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i^0 &= \sum_{i=1}^n (F_{i0} + v_i F_{A0} X) H_i^0 - \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i^0 \\ &= F_{A0} X \sum_{i=1}^n v_i H_i^0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{เมื่อ} \quad \sum_{i=1}^n v_i H_i^0 &= \Delta H_{Rxn}^0 \\ \sum_{i=1}^n F_i H_i^0 - \sum_{i=1}^n F_{i0} H_i^0 &= F_{A0} X \Delta H_{Rxn}^0 \end{aligned}$$

$$\text{แต่} \quad \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT = \Delta \hat{C}_p (T - T_R)$$

$$\text{และ} \quad \int_{T_0}^T C_{pi} dT = \tilde{C}_{pi} (T - T_0)$$

$$H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{pi} dT$$

$$v_i H_i(T) = v_i H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT$$

$$\sum_{i=1}^n v_i H_i(T) = \sum_{i=1}^n v_i H_i^0(T_R) + \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT$$

$$\text{แต่} \quad \Delta H_{Rxn}(T) = \sum_{i=1}^n v_i H_i(T)$$

$$\text{และ} \quad \Delta H_{Rxn}^0(T_R) = \sum_{i=1}^n v_i H_i^0(T_R)$$

$$\Delta H_{Rxn}(T) = \Delta H_{Rxn}^0(T_R) + \sum_{i=1}^n \int_{T_R}^T v_i C_{pi} dT$$

$$\therefore \Delta H_{Rxn}(T) = \Delta H_{Rxn}^0(T_R) + \Delta \hat{C}_p (T - T_R)$$

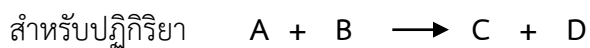
$$\text{แต่} \quad Q = -UA(T - T_o)$$

$$\text{และ} \quad H_i(T) = H_i^0(T_R) + \int_{T_R}^T C_{pi} dT$$

$$\text{ดังนั้น} \quad \frac{d}{dV} H_i(T) = \frac{d}{dV} H_i^0(T_R) + \frac{d}{dV} \int_{T_R}^T C_{pi} dT$$

$$\therefore \frac{d}{dV} H_i(T) = C_{pi} \frac{dT}{dV} \quad (2.27)$$

2.10.3 Stoichiometry [12]



Stoichiometry ในรูปของ F_{A0} และ X

เริ่มต้น	aA	+	bB	\rightarrow	cC	+	dD
	A	+	$\frac{b}{a}B$	\rightarrow	$\frac{c}{a}C$	+	$\frac{d}{a}D$
ใช้ไป	F_{A0}		F_{B0}		F_{C0}		F_{D0}
เหลือ	$-F_{A0}X$		$-\frac{b}{a}F_{A0}X$		$\frac{c}{a}F_{A0}X$		$\frac{d}{c}F_{A0}X$
สุดท้าย	$F_{A0} - F_{A0}X$		$F_{B0} - \frac{b}{a}F_{A0}X$		$F_{C0} + \frac{c}{a}F_{A0}X$		$F_{D0} + \frac{d}{a}F_{A0}X$

$$F_A = F_{A0}(1-X) \quad \text{เมื่อ} \quad \Theta_A = \frac{F_{A0}}{F_{A0}} = 1, \quad \nu = -\frac{a}{a} = -1$$

$$F_B = F_{A0} \left(\frac{F_{B0}}{F_{A0}} - \frac{b}{a}X \right) = F_{A0} (\Theta_B + \nu_B X) \quad \text{เมื่อ} \quad \Theta_B = \frac{F_{B0}}{F_{A0}}, \quad \nu_B = -\frac{b}{a}$$

$$F_C = F_{A0} \left(\frac{F_{C0}}{F_{A0}} + \frac{c}{a}X \right) = F_{A0} (\Theta_C + \nu_C X) \quad \text{เมื่อ} \quad \Theta_C = \frac{F_{C0}}{F_{A0}}, \quad \nu_C = \frac{c}{a}$$

$$F_D = F_{A0} \left(\frac{F_{D0}}{F_{A0}} + \frac{d}{a}X \right) = F_{A0} (\Theta_D + \nu_D X) \quad \text{เมื่อ} \quad \Theta_D = \frac{F_{D0}}{F_{A0}}, \quad \nu_D = \frac{d}{a}$$

จำนวนโมลทั้งหมดในตอนสุดท้าย

$$\begin{aligned}
 F_T &= F_A + F_B + F_C + F_D \\
 &= (F_{A0} - F_{A0}X) + \left(F_{B0} - \frac{b}{a}F_{A0}X\right) + \left(F_{C0} + \frac{c}{a}F_{A0}X\right) + \left(F_{D0} + \frac{d}{a}F_{A0}X\right) \\
 &= (F_{A0} + F_{B0} + F_{C0} + F_{D0}) + \left(-1 - \frac{b}{a} + \frac{c}{a} + \frac{d}{a}\right)F_{A0}X
 \end{aligned}$$

เมื่อ $\delta = -1 - \frac{b}{a} + \frac{c}{a} + \frac{d}{a}$ และ $F_{T0} = F_{A0} + F_{B0} + F_{C0} + F_{D0}$

จะได้ว่า

$$F_T = F_{T0} + \delta F_{A0}X$$

$$F_T = F_{T0} \left(1 + \delta \frac{F_{A0}}{F_{T0}} X\right) \quad \text{เมื่อ } y = \frac{F_{A0}}{F_{T0}}$$

$$F_T = F_{T0} (1 + \delta y_{A0} X)$$

เมื่อ $\varepsilon = \delta y_{A0}$, $\delta = -1 - \frac{b}{a} + \frac{c}{a} + \frac{d}{a}$

$\therefore F_T = F_{T0} (1 + \varepsilon X)$ หรือ $\frac{F_T}{F_{T0}} = (1 + \varepsilon X)$

สุดท้ายจะได้ค่า Stoichiometry คือ

$$F_A = F_{A0} (1 - X)$$

$$F_B = F_{A0} (\Theta_B + \nu_B X)$$

$$F_C = F_{A0} (\Theta_C + \nu_C X)$$

$$F_D = F_{A0} (\Theta_D - \nu_D X)$$

เขียนเป็นสมการรวมจะได้

$$\therefore F_i = F_{A0} (\Theta_i + \nu_i X) \quad (2.28)$$

หาอนุพันธ์ของสมการ

$$dF_i = dF_{A0} (\Theta_i + \nu_i X)$$

$$dF_i = F_{A0} \left[\frac{d\Theta_i}{dt} + \frac{d(\nu_i X)}{dt} \right] \quad \text{เมื่อ } \Theta_i = \text{เป็นค่าคงที่}$$

$$\therefore dF_i = F_{A0} \nu_i dX \quad (2.29)$$

พิจารณาจากสาร i เป็นสาร A

$$dF_A = F_{A0} \nu_i dX$$

$$= F_{A0} (-1) dX$$

$$\therefore dF_A = -F_{A0} dX \quad (2.30)$$

ค่าสุดท้ายของ Stoichiometry

$$F_A = F_{A0} (1 - X)$$

$$= F_{A0} - F_{A0} X$$

$$\therefore F_A - F_{A0} = -F_{A0} X \quad (2.31)$$

รวมสมการ

$$\Theta_i = \frac{F_i}{F_{A0}} = \frac{C_{i0} \nu_0}{C_{A0} \nu_0} = \frac{C_{i0}}{C_{A0}} = \frac{N_{i0}}{N_{A0}} = \frac{y_{i0}}{y_{A0}} \quad (2.32)$$

2.10.4 ปริมาณสัมพันธ์สำหรับก๊าซ (Stoichiometry for gas phase)

$$PV = F_T RT \quad (2.33)$$

$$V = \frac{F_T RT}{P} \quad (2.34)$$

ที่สภาวะเข้า : $V_0 = \frac{F_{T0} RT_0}{P_0} \quad (2.35)$

นำสมการ 2.34 หารสมการ 2.35

$$\frac{V}{V_0} = \frac{\frac{F_T RT}{P}}{\frac{F_{T0} RT_0}{P_0}}$$

จะได้ $\frac{V}{V_0} = \left(\frac{F_T}{F_{T0}} \right) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.36)$

จาก $\frac{F_T}{F_{T0}} = (1 + \epsilon X)$

แทนค่าในสมการ 2.36

$$\frac{V}{V_0} = (1 - \epsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)$$

จะได้ $V = V_0 (1 - \epsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (2.37)$

จากสมการ 2.28 : $F_i = F_{A0} (\Theta_i + \nu_i X)$

นำสมการ 2.28 หาด้วยสมการ 2.37

$$\frac{F_i}{V} = \frac{F_{A0} (\Theta_i + \nu_i X)}{V_0 (1 - \varepsilon X) \left(\frac{P_0}{P} \right) \left(\frac{T}{T_0} \right)}$$

$$\text{จะได้} \quad \frac{F_i}{V} = \left(\frac{F_{A0}}{V_0} \right) \frac{(\Theta_i + \nu_i X)}{(1 - \varepsilon X)} \left(\frac{P}{P_0} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right) \quad (2.38)$$

$$\text{เมื่อ} \quad C_i = \frac{F_i}{V} \quad \text{และ} \quad C_{A0} = \left(\frac{F_{A0}}{V_0} \right)$$

แทนค่าลงในสมการ 2.38 จะได้ว่า

$$C_i = \frac{C_{A0} (\Theta_i + \nu_i X)}{(1 - \varepsilon X)} \left(\frac{P}{P_0} \right) \left(\frac{T_0}{T} \right) \quad (2.39)$$

2.11 Microsoft Excel

ไมโครซอฟท์เอกซ์เซลเป็นโปรแกรมทางด้านตารางคำนวณ หรือที่เรียกว่า เสปรดชีต (Spreadsheet) เป็นโปรแกรมในชุดไมโครซอฟท์ออฟฟิศ มีความสามารถในการสร้างตาราง การคำนวณ การวิเคราะห์ การออกรายงานในรูปแบบตารางและกราฟ [13]

2.11.1 ประโยชน์ของ Microsoft Excel

2.11.1.1 สร้างตารางทำงาน จัดตารางสวยงาม ในรูปแบบต่างๆ

2.11.1.2 สร้างเอกสารที่ต้องมีการคำนวณ เชื่อมโยงสูตร (สามารถเชื่อมโยงในไฟล์เดียวกันข้ามไฟล์ หรือ ข้ามเครื่องก็ได้)

2.11.1.3 งานจัดเก็บข้อมูลเบื้องต้นที่จำนวนข้อมูลไม่เกิน 1 ล้านแถว (ในทางปฏิบัติ แนะนำว่าไม่เกิน หลักแสน จะทำงานได้คล่องตัว)

2.11.1.4 สร้างรายงานสรุปผลในมุมมองต่างๆ เช่น ตารางสรุปยอดขาย ตารางสรุปข้อมูลสินค้า สรุปงบดุล สรุปแผนการผลิต สรุปข้อมูล ขาดลามาสาย ของพนักงาน เป็นต้น

2.11.1.5 สร้างกราฟ นำเสนอข้อมูล ในรูปแบบต่างๆ ไม่ว่าจะเป็นกราฟแท่ง กราฟเส้น วงกลม จุด ทั้ง 2 มิติ และ 3 มิติ มีรูปแบบต่างๆ มากมาย [13]

2.12 Macro Excel

แมโครเป็นเครื่องมือที่ใช้เพิ่มการปฏิบัติงานบางประการของโปรแกรมสำเร็จบางโปรแกรมที่มีลักษณะเป็นโปรแกรมที่ซ่อนอยู่ภายใต้โปรแกรมอื่นๆ อีกที เป็นต้นว่า โปรแกรมเอกซ์เซล จะมีแมโครที่ทำงานได้เฉพาะเมื่อเรียกใช้โปรแกรมเอกซ์เซลในโปรแกรมแมโครนี้ ผู้ใช้จะเป็นผู้เขียนขึ้นเอง เพื่อสั่งให้ประมวลผลตามที่คุณต้องการ นอกเหนือไปจากการทำงานตามปกติของโปรแกรมอื่นๆ เช่น แมโครเพื่อทำการ Copy ข้อมูลยอดขายที่ได้มาแต่ละเดือน เข้าไปยัง Workbook ของข้อมูลยอดขายทั้งหมด เป็นต้น โดยไม่ใครซอฟต์แวร์ออกมาให้สร้างแมโครได้ง่าย ๆ โดยการบันทึก (Record Macro) โดยจะบันทึกการกระทำที่ทำการบันทึกเอาไว้ เพื่อสามารถเรียกใช้งานได้ในภายหลัง โดยจะเก็บเป็นโปรแกรมด้วยภาษา Visual Basic หรือที่เรียกว่า Visual Basic for Application (VBA) [14]

2.12.1 ภาษาที่ใช้บันทึก Macro

2.12.1.1 ภาษาโลตัสสคริปต์ (Lotus Script) ของ Lotus Development

2.12.1.2 ภาษาแซกซ์ เบสิก (Sax Basic) ของ Sax Software Corporation

2.12.1.3 ภาษาวิซวลเบสิกเพื่อโปรแกรมประยุกต์ (Visual Basic for Application, VBA)

ของ Microsoft Corporation

2.12.1.4 ภาษาซันสคริปต์ (Sun Script) ของ Sun Microsystem [14]

2.12.2 ประโยชน์ของ Macro

2.12.2.1 ลดระยะเวลาในการทำงานซ้ำ ๆ ลง

2.12.2.2 เพิ่มประสิทธิภาพในการทำงาน

2.12.2.3 ช่วยให้ผู้ที่ไม่มีความรู้เกี่ยวกับเอกซ์เซลมาทำกระบวนการที่ซับซ้อนได้

โดยการรันแมโครที่บันทึกไว้ได้

2.12.2.4 ช่วยให้ข้อมูลทำงานเป็นรูปแบบเดียวกัน เพราะจะได้ผลลัพธ์เหมือนกัน

แม้ต่างคนจะต่างใช้งาน [14]

2.12.3 ประเภทของการบันทึกแมโครในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

2.12.3.1 การบันทึกแมโครแบบสัมบูรณ์ (Absolutely Macro Recording)

2.12.3.2 การบันทึกแมโครแบบสัมพัทธ์ (Relative Reference Macro Recording)

2.12.3.3 การบันทึกแมโครแบบกำหนดการกระทำอัตโนมัติ (Automatic Macro Recording)

ก. การบันทึกแมโครแบบกำหนดการกระทำอัตโนมัติเมื่อเปิดแฟ้ม

ข. การบันทึกแมโครแบบกำหนดการกระทำอัตโนมัติเมื่อปิดแฟ้ม [14]

2.12.4 แหล่งเก็บแมโครในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

2.12.4.1 สมุดทำการปัจจุบัน (This Workbook)

2.12.4.2 สมุดทำการใหม่ (New Workbook)

2.12.4.3 สมุดทำการส่วนบุคคล (Personal Macro Workbook) [14]

2.13 วิธีตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม

ขั้นตอนการตรวจสอบความผิดพลาดของโปรแกรม (Testing and Debugging the Program) หลังจากเขียนโปรแกรมเสร็จสิ้นเรียบร้อยแล้ว ต้องทำการตรวจสอบเพื่อดูว่ามีความถูกต้องตรงตามความต้องการของผู้ใช้งานหรือไม่

2.13.1 ความผิดพลาด (Error) ที่สามารถเกิดขึ้นได้จากการเขียนโปรแกรม มี 3 รูปแบบ คือ

2.13.1.1 Syntax Error คือ ข้อผิดพลาดจากการใช้ภาษาไวยากรณ์ที่ผิด หรือการเขียนคำสั่งโปรแกรมผิดรูปแบบไวยากรณ์

2.13.1.2 Logic errors คือ เป็นข้อผิดพลาดที่เกิดจากการใช้ตรรกะผิดในโปรแกรม ซึ่งเงื่อนไขผิดมีผลให้การกระทำตามเงื่อนไขผิดไปด้วย

2.13.1.3 System design errors คือ เป็นข้อผิดพลาดจากการออกแบบระบบทำให้ผลของการทำงานไม่เป็นที่ยอมรับของผู้ใช้ ซึ่งความผิดพลาดนี้ อาจเกิดจากการสื่อสารระหว่างโปรแกรมเมอร์กับผู้วิเคราะห์ระบบ [15]

2.13.2 วิธีตรวจสอบความถูกต้องโปรแกรม มี 2 วิธี

2.13.2.1 การตรวจสอบด้วยตัวเอง (Self Checking) ให้เขียนโปรแกรมลงกระดาษก่อนแล้วไล่เช็คตรวจสอบการทำงานที่ละขั้นตอนด้วยตัวเองว่าจะมีการทำงานที่ถูกต้องตามความต้องการหรือไม่ [16]

2.13.2.2 ตรวจสอบด้วยการแปลภาษา (Translating) หลังจากที่เขียนโปรแกรมเสร็จแล้วจะมีการตรวจสอบด้วยตนเองเรียบร้อยแล้วก็จะป้อนโปรแกรมเข้าสู่เครื่องคอมพิวเตอร์เพื่อทำการแปลโปรแกรมโดยจะต้องเรียกใช้ตัวแปลภาษาโปรแกรม ที่เรียกว่า คอมไพเลอร์ (Compiler) หรืออินเตอร์พรีเตอร์ (Interpreter) อย่างใดอย่างหนึ่งทำการแปลภาษาโปรแกรมให้เป็นภาษาเครื่องการแปลนี้จะเป็นการตรวจสอบความผิดพลาดของโปรแกรมด้วย ซึ่งถ้ามีข้อผิดพลาดใดๆ เครื่องคอมพิวเตอร์จะแจ้งให้ทราบทางหน้าจอ [17]

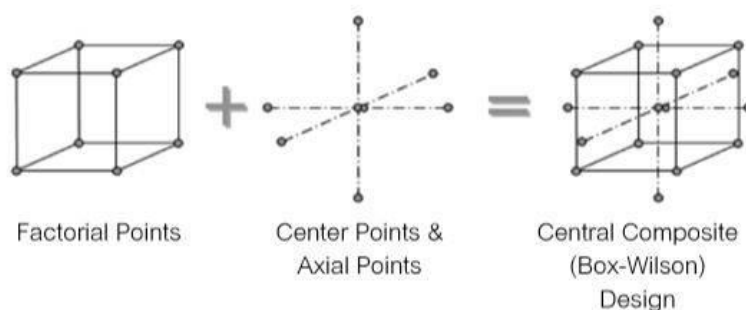
2.14 การออกแบบคอมโพสิตกลาง (Central Composite Design) [29]

ในการทำการออกแบบการทดลอง (design of experiment) หรือที่มักเรียกกันว่า DOE อาจต้องการศึกษากระบวนการที่มีความสัมพันธ์เชิงเส้นโค้ง (quadratic relationship) กล่าวคือ เมื่อตัวแปรตัวใดตัวหนึ่งเพิ่มหรือลดค่า ค่าการตอบสนอง (Response) อาจเปลี่ยนแปลงในลักษณะที่ไม่เป็นเส้นตรงแต่มีลักษณะเป็นเส้นโค้งแทน โดยจะสามารถพบกระบวนการต่างๆที่มีลักษณะเช่นนี้ได้อยู่บ่อยๆบางกระบวนการในหลายอุตสาหกรรม เช่น กระบวนการทางเคมี กระบวนการแปรรูปโลหะ เป็นต้น การออกแบบการออกแบบคอมโพสิตกลาง (Central Composite Design, CCD) เป็นการทดลองที่ 3 ระดับ (นิยมแทนด้วยสัญลักษณ์ $-1, 0, +1$) กล่าวคือ จะปรับตัวแปรที่ต้องการศึกษาไป ตัวแปรละ 3 ค่า แต่แทนที่จะปรับตัวแปรแบบ Full Combination หรือ Full Factorial กลับเลือกบาง Runs หรือบางสภาวะการทดลองที่จำเป็น เพื่อให้ได้ข้อมูลเพียงพอต่อการสร้างแบบจำลองทางสถิติ โดยโมเดล (Model) ที่ได้จะยังคงมีทั้ง Main Effect, Interaction และ Quadratic Terms โดยใช้ทรัพยากรไม่มากจนเกินไป ซึ่งจะเห็นได้ว่า CCD ประกอบไปด้วย 3 ส่วน คือ

2.14.1 Factorial Points ซึ่งในที่นี้เป็นการนำ 2-Level Full Factorial มาเป็นส่วนหนึ่งของการทดลอง

2.14.2 Axial Points เป็นการปรับค่าตัวแปรใดตัวแปรหนึ่งในขณะที่ Fix ให้ค่าตัวแปรอื่นอยู่ที่ค่ากลาง (หรือค่า 0)

2.14.3 Center Points เป็นการปรับค่าของตัวแปรทุกตัวแปรที่ค่ากลาง (หรือค่า 0)



รูปที่ 2.8 Central Composite Design สำหรับ 3 Factors

ที่มา : จรัล ทรัพย์เสรี, 2009

ขอบเขตที่นิยมใช้ในการวิเคราะห์แผนแบบ พื้นผิวตอบสนอง คือ ขอบเขตทรงกลม (Spherical region) หรือ CCD รูปทรงกลม เพราะทำให้แผนแบบพื้นผิวตอบสนองเป็นแผนแบบที่สามารถหมุนได้ (Rotatable design) และทำให้ความแปรปรวนของค่าพยากรณ์ไม่เปลี่ยนแปลง เมื่อแผนแบบถูกหมุนรอบจุดศูนย์กลาง

2.15 โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) [30]

โปรแกรมมินิแท็บ คือ โปรแกรมสำเร็จรูป หรือเครื่องมือที่ใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูล และประมวลผลทางสถิติ ข้อมูลที่นำมาวิเคราะห์จะถูกเก็บในรูปแบบของ Worksheet สามารถวิเคราะห์ข้อมูลทางสถิติพื้นฐาน วิเคราะห์ข้อมูลทางสถิติขั้นสูง การออกแบบการทดลอง การประเมินผลกระบวนการ และการสร้างเครื่องมือควบคุมคุณภาพ เช่น Histogram, Fish Bone Diagram, Pareto Chart และ Control Chart มีการนำโปรแกรมมินิแท็บไปประยุกต์ใช้งานหลายประเภท เช่น งานเกี่ยวกับควบคุมคุณภาพ เป็นต้น โดยโปรแกรมมินิแท็บเข้ามามีบทบาทสำหรับผู้ใช้งานในส่วนของประมวลผลและการแสดงผลข้อมูลในลักษณะของตัวเลข และผลในลักษณะของกราฟ ประกอบกับเทคโนโลยีทางด้านคอมพิวเตอร์ได้พัฒนา และมีบทบาทต่อชีวิตประจำวัน ดังนั้นโปรแกรมมินิแท็บจึงถูกเลือกใช้ด้วยเหตุผลหลัก 3 ประการ คือ

2.15.1 ความซับซ้อนในการประมวลผล (Complexity)

2.15.2 ความเที่ยงตรงและแม่นยำในการประมวลผลข้อมูล (Accuracy)

2.15.3 ความรวดเร็วและความสามารถในการทำซ้ำ (Repeatability)

2.16 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ปี ค.ศ. 2001 M.E.E. Abashar ได้ทำการทดลองสำหรับการสลายตัวของแอมโมเนียในเครื่องปฏิกรณ์แบบเมมเบรนแบบตัวเร่งปฏิกิริยาโดยมีการใช้ความร้อนร่วมด้วย และความสมดุลในการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิสามารถทำให้สำเร็จได้โดยการเพิ่มปฏิกิริยา และใช้กลยุทธ์หลากหลายรูปแบบสำหรับการเร่งปฏิกิริยาแบบต่างๆ จึงได้มีการศึกษารูปแบบที่แตกต่างกันของชั้นในเครื่องปฏิกรณ์เพื่อช่วยในการกระตุ้นปฏิกิริยา โดยพิจารณา 2 ปฏิกิริยาที่สำคัญ ปฏิกิริยาแรกคือ การย่อยสลายของแอมโมเนีย และ ปฏิกิริยาในการเปลี่ยนคาร์บอนไดออกไซด์ไปเป็นมีเทนเป็นปฏิกิริยาที่สอง และมีการใช้เกณฑ์ที่มีประสิทธิภาพในการประเมินประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์นี้ ทั้งยังมีการศึกษาและอธิบายถึงสภาวะที่เหมาะสมที่สุดในเครื่องปฏิกรณ์ ผลการทดลองที่ได้บ่งชี้ถึงการพัฒนาประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์มากมาย ดังนี้ ในส่วนของการเปลี่ยนแปลงไปใช้อุณหภูมิที่ต่ำ และการลดจำนวนของตัวกระตุ้นปฏิกิริยาที่ใช้ในเครื่องปฏิกรณ์อีกด้วย ถึงแม้ว่าในการทดลองจะมีการจำกัดการใช้ชั้นในเครื่องปฏิกรณ์แค่ 2 ชั้น แต่ก็ทำให้สามารถรู้ได้ถึงลักษณะหลายๆอย่างของระบบนี้ [4]

ปี ค.ศ. 2002 M.E.E. Abashar และคณะ ได้สร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ใช้ในการจำลองเครื่องปฏิกรณ์แบบเมมเบรนแบบตัวเร่งปฏิกิริยาเชิงพื้นที่สำหรับการสลายตัวของแอมโมเนีย โดยใช้ นิกเกิล, อะลูมิเนียมออกไซด์ เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา เนื่องจากปฏิกิริยาเป็นปฏิกิริยาสมดุลที่กำจัดผลิตภัณฑ์ไฮโดรเจน โดยเมมเบรนเกิดจากความสมดุลทางอุณหพลศาสตร์ (thermodynamic equilibrium) สำหรับการเคลื่อนที่ของสมดุลทางอุณหพลศาสตร์ (thermodynamic equilibrium) ปฏิกิริยา methanation ที่มีต่อตัวเร่งปฏิกิริยาใช้เพื่อขจัดส่วนของไฮโดรเจน ส่วนตัวเร่งปฏิกิริยาทั้งสองตัวจะถูกรวมเข้าด้วยกันในรูปแบบต่างๆ ซึ่งงานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาผลของรูปแบบตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีต่อการสลายตัวของแอมโมเนีย ผลการวิจัยพบว่ารูปแบบของการปรับปรุงเครื่องปฏิกรณ์ส่งผลให้ได้ความเข้มข้นที่สูง และการสลายตัวที่สมบูรณ์ของแอมโมเนียสามารถทำได้ที่อุณหภูมิต่ำ [20]

ปี ค.ศ. 2017 Shreya Mukherjee และคณะ ได้ทำการศึกษาตัวเร่งปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนียในอุณหภูมิต่ำสำหรับการผลิตไฮโดรเจน ซึ่งในปัจจุบันการสลายตัวของแอมโมเนียด้วยตัวทำละลายที่สมบูรณ์แบบสำหรับการสร้างไฮโดรเจนที่อุณหภูมิต่ำ ($<450^{\circ}\text{C}$) กำลังได้รับความสนใจเป็นอย่างมาก เนื่องจากการผลิตไฮโดรเจนที่ได้จากการสลายตัวของแอมโมเนียมีความท้าทายทั้งในด้านการจัดเก็บและการขนส่ง แอมโมเนียจะแตกตัวให้ไฮโดรเจนที่ปราศจากคาร์บอนไดออกไซด์ซึ่งมีปริมาตรที่ดีและความหนาแน่นของพลังงาน gravimetric ที่มีเทคโนโลยีที่ใช้ได้สำหรับการจัดเก็บและขนส่งที่มีประสิทธิภาพ ตัวเร่งปฏิกิริยาสำหรับการสลายตัวของแอมโมเนียคือ รูเทเนียม ที่ถูกเติมด้วยโพแทสเซียมแบเรียมและซีเซียม และเป็นตัวช่วยเร่งให้เกิดสารออกไซด์และคาร์บอน ตัวเร่งปฏิกิริยาเหล่านี้ยังไม่สามารถใช้งานได้อย่างมีประสิทธิภาพสำหรับการย่อยสลายแอมโมเนียที่อุณหภูมิต่ำ งานวิจัยนี้ให้ความสำคัญอย่างยิ่งต่อการพัฒนาตัวเร่งปฏิกิริยาโลหะที่ไม่มีการเปลี่ยนแปลงในรูปแบบต่างๆ กลไกของการสลายตัวของแอมโมเนียในโลหะ และเน้นไปที่การเปลี่ยนแปลงโลหะผสมลิเทียมไนไตร์ที่ทำงานร่วมกันได้ดีสำหรับการสลายตัวที่มีประสิทธิภาพของแอมโมเนียในอุณหภูมิต่ำ [21]

อุณาโลม เวทย์วัฒน์ และคณะ ได้ทำงานวิจัยโดยมีวัตถุประสงค์เพื่อศึกษาสถานะที่เหมาะสมสำหรับการสังเคราะห์แอมโมเนียบนตัวเร่งปฏิกิริยาประเภทเหล็กโดยทำการศึกษาด้วยแบบจำลอง ASPEN PLUS ซึ่งมีสารตั้งต้นเป็นก๊าซไนโตรเจนและไฮโดรเจนจากก๊าซสังเคราะห์ที่มีอัตราส่วนของไฮโดรเจนต่อคาร์บอนมอนอกไซด์เท่ากับสามต่อหนึ่ง ซึ่งก๊าซสังเคราะห์นี้ได้มาจากปฏิกิริยาตีร์ฟอร์หมิงของวัตถุดิบที่หาได้ง่ายในประเทศไทย โรงงานอุตสาหกรรมการผลิตแอมโมเนียได้จำลองขึ้นโดยการใส่เตาปฏิกรณ์ประเภทแบบเบดนิ่งชนิดเอเดียแบติกโดยใช้วิธี Sauve-Redlich-Kwong Property ก๊าซตั้งต้นประกอบด้วยไฮโดรเจน 59.4%, ไนโตรเจน 19.8%, คาร์บอนมอนอกไซด์ 19.8% และ อาร์กอน 1.0% โดยโมล ผลการทดลองพบว่าอุณหภูมิและความดันที่เหมาะสมกับการสังเคราะห์แอมโมเนียด้วยวิธี Haber คือ 231°C และ 150 บรรยากาศตามลำดับ [22]

งานวิจัยนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อจัดตั้งโครงการ สอนการประยุกต์ใช้โปรแกรม VBA ที่ใช้งานร่วมกับโปรแกรมเอกซ์เซลในด้านวิศวกรรมเคมี ที่มหาวิทยาลัยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยีฮ่องกง (HKUST) ในปี ค.ศ. 2010 โดยเน้นตัวอย่างที่เกี่ยวข้องและงานวิจัยที่ได้รับการคัดเลือกจากหลักสูตรของวิศวกรรมเคมี ซึ่งหลักสูตรนี้ได้รับการออกแบบโดยไม่ได้เน้นเฉพาะวิธีการด้านโปรแกรมอย่างเดียว แต่ยังเกี่ยวกับการแก้ปัญหาทางวิศวกรรมเคมี ซึ่งปัญหาทางวิศวกรรมเคมีหลายด้านได้รับเลือกให้เป็นโครงการหรือโครงการ

สาธิต เพื่อให้นักเรียนได้รับประโยชน์จากการเขียนโปรแกรมในเอกซ์เซลร่วมกับ VBA โดยภาษาและซอฟต์แวร์ที่ใช้ในการเขียนโปรแกรม ผู้เชี่ยวชาญได้ทำตัวอย่างการสาธิตเหล่านี้ไว้ เช่น การออกแบบเครื่องช่วยในการทำงาน การควบคุมกระบวนการ และการเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ เช่น โปรแกรมการออกแบบในการป้อนสารเข้าเครื่องปฏิกรณ์ชีวภาพแบบเฟดแบทช์ (Fed-batch Bioreactor) รวมถึงข้อดีและข้อเสียของการเขียนโปรแกรมในเอกซ์เซลร่วมกับ VBA เพื่อให้นักเรียนได้เข้าใจและเปรียบเทียบกับโปรแกรมอื่นๆได้ [23]

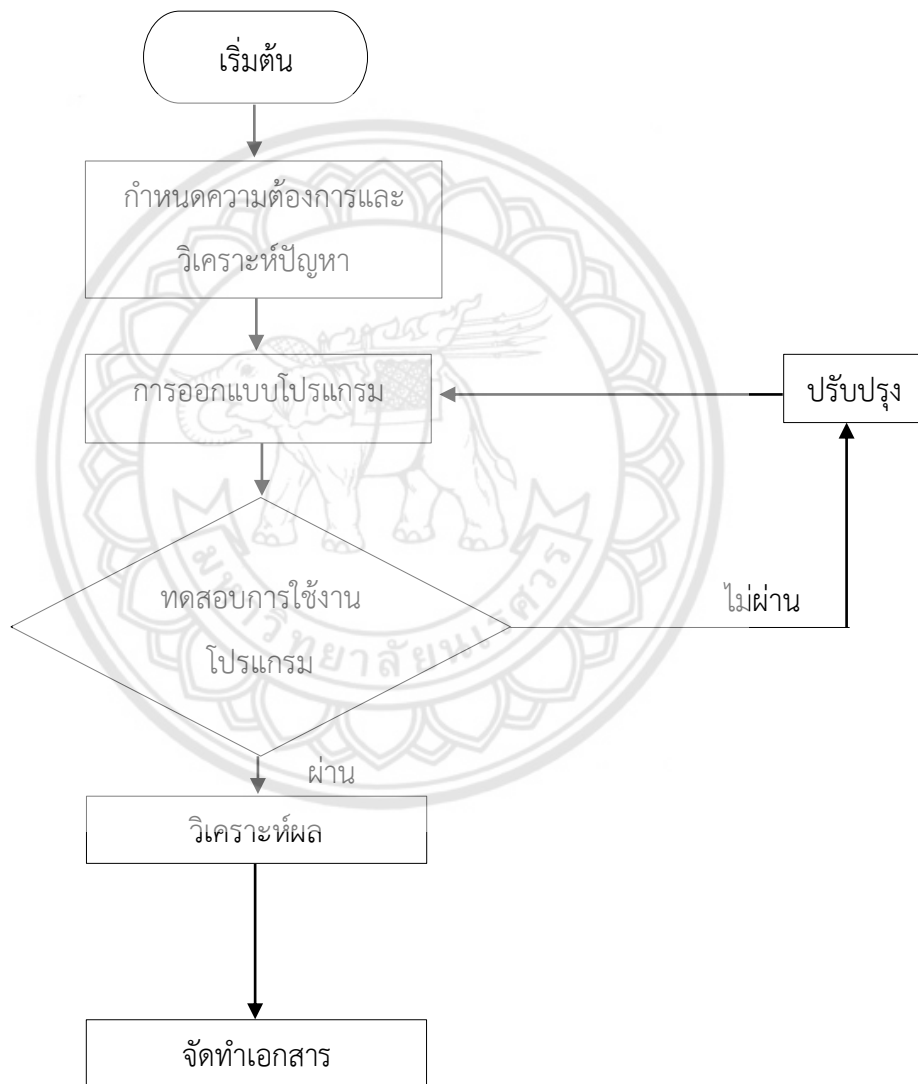
Josue Villesca และคณะ ได้ศึกษากระบวนการสังเคราะห์แอมโมเนียของโรงงาน Haldor-Topsoe โดยใช้โปรแกรม ASPEN Simulation ในการจำลองกระบวนการสังเคราะห์แอมโมเนีย งานวิจัยนี้ออกแบบการผลิตแอมโมเนีย 1,016 เมตริกตันต่อวัน ที่อัตราการไหลเชิงมวลของสารขาเข้า 5,500 กิโลโมลต่อชั่วโมง โดยจำลองกระบวนการใน ASPEN ด้วยเครื่องปฏิกรณ์แบบ adiabatic Gibbs ซึ่งการผลิตแอมโมเนียที่ดีที่สุด ความดันที่ใช้ในเครื่องปฏิกรณ์จะอยู่ที่ 100 บาร์ และ 7.25 % (purge stream) จะส่งผลให้ได้ความบริสุทธิ์ของแอมโมเนียเท่ากับ 98.96 % ซึ่งงานวิจัยนี้ให้ความสำคัญกับ ค่าความดัน และ ประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์ และใช้ยูเทเนียมเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา [24]

ปี ค.ศ. 2014 Fakhteh Siavashi และคณะ ได้ทำการศึกษาการสลายตัวของแอมโมเนียโดยใช้เครื่องปฏิกรณ์เมมเบรนสำหรับแยกแก๊สไฮโดรเจน (hydrogen-perm selective) และระบบเซลล์เชื้อเพลิงโซลิดออกไซด์ (SOFC) มีการใช้ Ni/Al_2O_3 เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา เพื่อลดการปลดปล่อยแอมโมเนียในชั้นบรรยากาศ ในวิธีการนี้ แอมโมเนีย และ มีเทน ถือเป็นก๊าซเรือนกระจกหลักที่ถูกปล่อยออกมา จะถูกแปลงเป็นไฮโดรเจนบริสุทธิ์จากปฏิกิริยาของมีเทน (methane steam reforming) และปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนีย บนตัวเร่งปฏิกิริยาที่มีนิกเกิลเป็นองค์ประกอบ ไฮโดรเจนจะแทรกผ่าน Pd-Ag Membrane และถูกส่งต่อไปยัง SOFC ผลการทดลองของการสร้างแบบจำลองแสดงให้เห็นว่าการเพิ่มอุณหภูมิและความดันของเครื่องปฏิกรณ์จะทำให้ได้การแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน และแอมโมเนียมีค่าเท่ากับ 100% ที่อุณหภูมิ 873 เคลวิน และความดัน 35 บาร์ ผ่านความยาว 0.6 ของเครื่องปฏิกรณ์ และจากการตรวจสอบประสิทธิภาพของเครื่องปฏิกรณ์แสดงให้เห็นว่าอัตราการแทรกซึมของไฮโดรเจนเพิ่มขึ้นเมื่อเพิ่มอุณหภูมิและความดันของเครื่องปฏิกรณ์ นอกจากนี้ผลการสร้างแบบจำลองบ่งชี้ว่าประสิทธิภาพการทำงานของ SOFC ที่ดีขึ้นด้วยการเพิ่มอุณหภูมิและอัตราส่วนการใช้ [25]

บทที่ 3

วิธีดำเนินการนิงานวิจัย

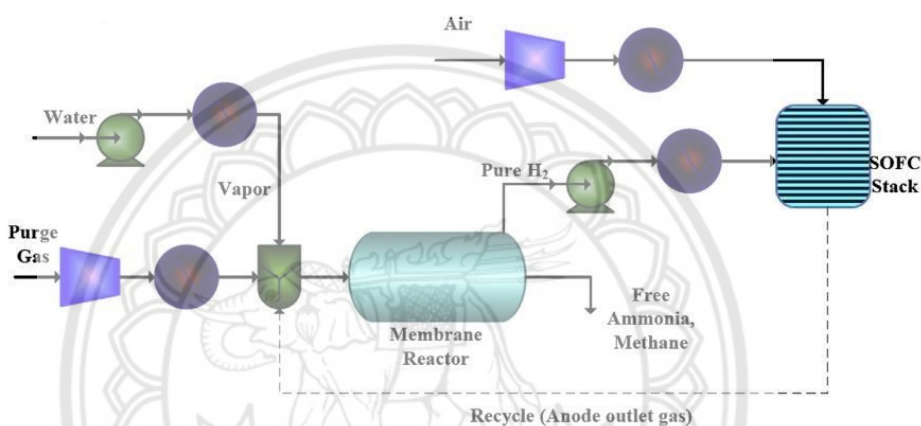
การดำเนินงานวิจัยการหาสถานะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอน ในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องของกระบวนการ การสลายตัวของแอมโมเนีย สามารถแสดงขั้นตอนของการดำเนินงานวิจัยในรูปแบบของผังงานแสดงขั้นตอนการดำเนินงาน ดังนี้



รูปที่ 3.1 ผังงานแสดงขั้นตอนดำเนินงาน

3.1. กำหนดความต้องการและวิเคราะห์ปัญหา

จากความก้าวหน้าทางด้านฮาร์ดแวร์และซอฟต์แวร์คอมพิวเตอร์ ได้ถูกนำมาใช้แก้ไขปัญหาที่ซับซ้อนในการทำงานด้านวิศวกรรมเคมี เช่น โปรแกรม Aspen plus, Minitab 18 ซึ่งทางคณะผู้จัดทำได้ประยุกต์ใช้แมโคร และ VBA ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล มาใช้ในการวิเคราะห์เนื่องจากเป็นโปรแกรมที่ใช้งานง่าย และสามารถวิเคราะห์ปัญหาได้ คณะผู้จัดทำจึงได้นำกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนียมาใช้ในการศึกษาและเขียนโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์

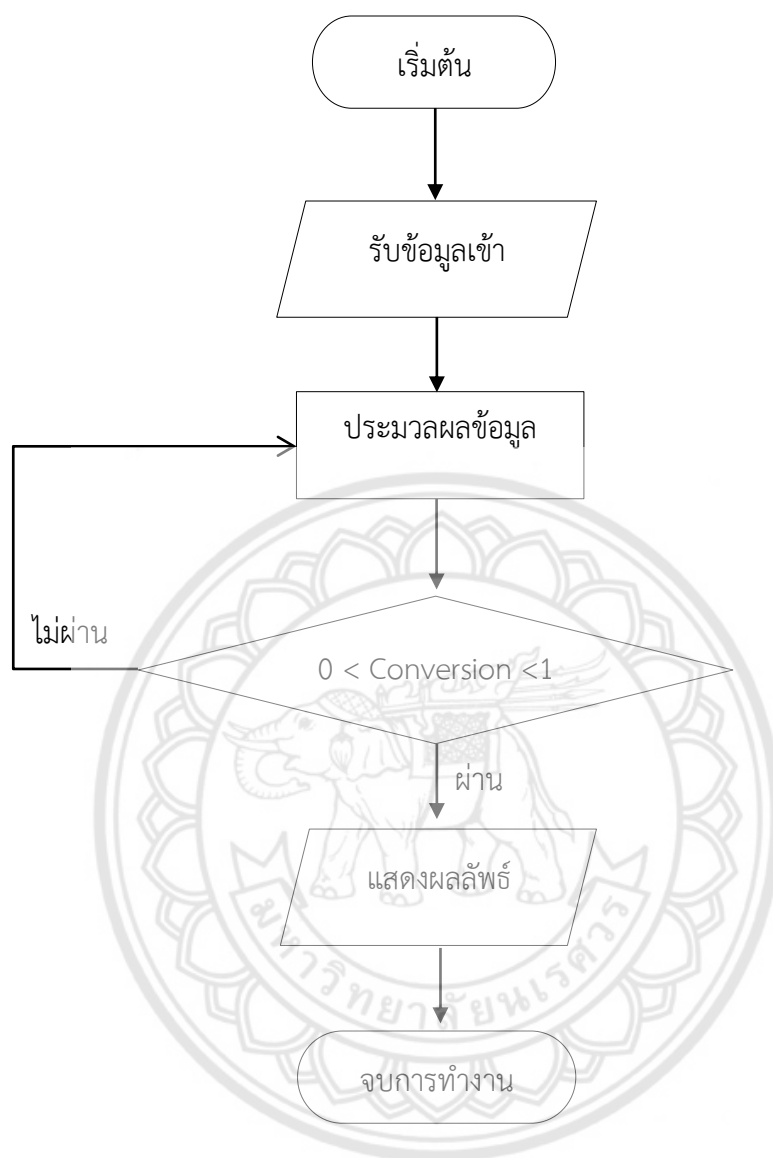


รูปที่ 3.2 PFD การสลายตัวของแอมโมเนียในเครื่องปฏิกรณ์แบบเมนเบรนร่วมกับระบบเซลล์เชื้อเพลิงโซลิดออกไซด์ (SOFC)

ที่มา : งานวิจัยของ Fakhteh Siavashi และคณะ [25]

จากงานวิจัยของ Fakhteh Siavashi และคณะ ได้ทำการศึกษาการสลายตัวของแอมโมเนียโดยใช้เครื่องปฏิกรณ์เมนเบรนร่วมกับระบบเซลล์โซลิดออกไซด์ (SOFC) ภายใต้สภาวะคงที่ (Steady state) คณะผู้จัดทำจึงได้นำการสลายตัวของแอมโมเนียมาประยุกต์ใช้กับเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ภายใต้สภาวะไม่คงที่ (UnSteady state) โดยการออกแบบโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสม ซึ่งคำว่าเหมาะสมในการออกแบบถังปฏิกรณ์คือ ต้องสามารถทำให้เกิดผลิตภัณฑ์ที่ต้องการมากที่สุด

3.2. การออกแบบโปรแกรม



รูปที่ 3.3 ผังงานแสดงขั้นตอนการออกแบบโปรแกรม

ออกแบบการทดลองโดยใช้ Central Composite design (CCD) แบบ Spherical CCD มี 3 พารามิเตอร์ ซึ่งประกอบด้วย อุณหภูมิ ความดัน และปริมาตร

3.2.1 การระบุข้อมูลขาเข้า

- | | | |
|------------------|-------------|--------|
| (1) อุณหภูมิช่วง | 900 ถึง 950 | เคลวิน |
| (2) ความดันช่วง | 4 ถึง 5 | บาร์ |

(3) ปริมาตรของถังปฏิกรณ์ช่วง 50 ถึง 100

ลูกบาศก์เมตร

(4) อัตราการไหลเชิงมวลขาเข้า

กรัมโมลต่อวินาที

สำหรับการเลือกช่วงอุณหภูมิและความดันที่ใช้ในการศึกษา จะเห็นว่าคณะผู้จัดทำเลือกช่วงอุณหภูมิที่ค่อนข้างสูง และช่วงของความดันค่อนข้างต่ำ เนื่องจากแอมโมเนียจะเสถียรที่อุณหภูมิปกติ แต่จะสลายตัวให้ไนโตรเจนและไฮโดรเจนที่อุณหภูมิสูงและที่ความดันค่อนข้างต่ำ ซึ่งการสลายตัวเริ่มต้นที่อุณหภูมิ 450-500 องศาเซลเซียส (723-773 เคลวิน) [2] ซึ่งถ้าความดันสูงเกินไปจะทำให้ปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนียเกิดการย้อนกลับส่งผลให้แอมโมเนียไม่เกิดการสลายตัว สำหรับการเลือกช่วงปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องนั้น จะพิจารณาจากปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนียเนื่องจากการสลายตัวของแอมโมเนียเกิดขึ้นไว้มากๆ ดังนั้นการกำหนดช่วงปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์จึงไม่จำเป็นต้องใหญ่มาก

3.2.2 การระบุข้อมูลขาออก

(1) การแปลงผัน (Conversion)

(2) อัตราการไหลเชิงมวลขาออก

(3) อุณหภูมิขาออก

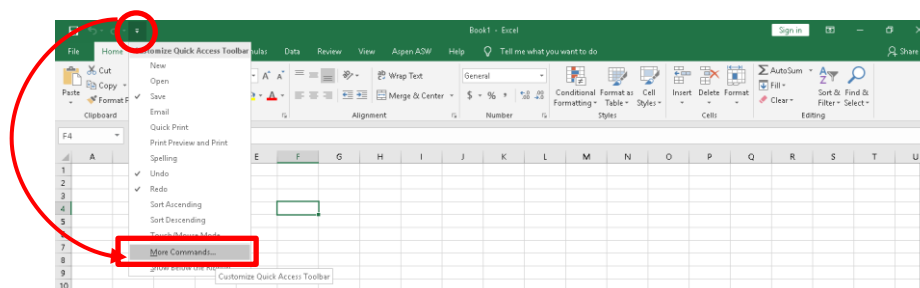
กรัมโมลต่อวินาที

เคลวิน

3.3 Visual Basic for Applications : VBA

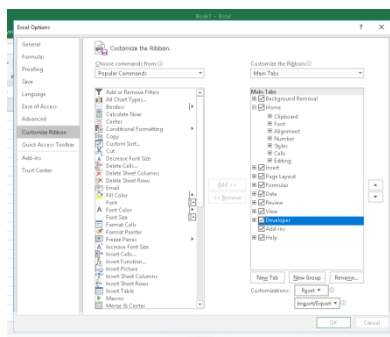
3.3.1 การเพิ่ม Developer Tab สำหรับการใช้งาน Macro ควรเพิ่มเมนู Developer ก่อนเพื่อความสะดวกในการใช้งาน

(1) คลิกปุ่ม Dropdown ตรง Customize Quick Access Toolbar เลือก More Commands... ดังรูปที่ 3.3



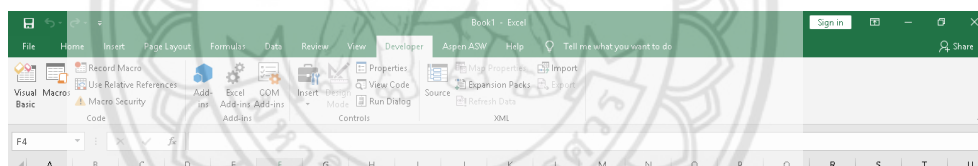
รูปที่ 3.4 การเพิ่มแถบ

(2) คลิก Tab Customize Ribbon จากนั้นทำเครื่องหมาย ที่ Developer แล้วคลิก OK



รูปที่ 3.5 การเพิ่มแถบ Developer

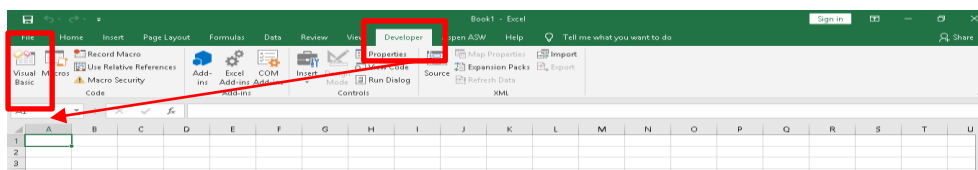
(3) ได้แถบ Developer จะเห็นว่า มีเครื่องมือสำหรับการบันทึก Macro การเขียน VBA และ แถบเครื่องมืออื่นๆ



รูปที่ 3.6 แถบเครื่องมือต่างๆของแถบ

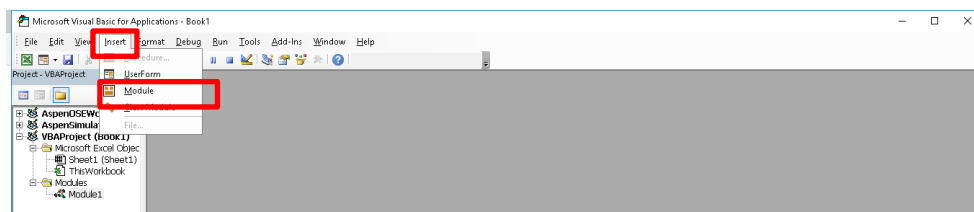
3.3.2 การเปิดใช้งานหน้าต่าง VBA

(1) การเปิดหน้าต่าง VBA (Visual Basic for Applications) เพื่อใช้งาน ให้คลิกที่ นักพัฒนา (Developer) เลือก Visual Basic

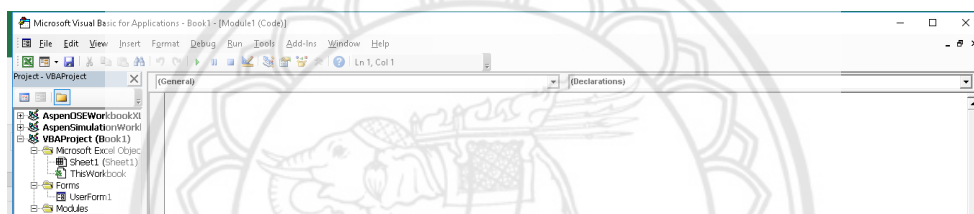


รูปที่ 3.7 การเปิดหน้าต่าง VBA

(2) จะได้หน้าต่างของ Visual Basic ออกมาดังรูปที่ 3.7 จากนั้นสร้างหน้าต่างของ Module ทำการกด Insert เลือก Module จะได้หน้าต่าง Module ออกมาดังรูปที่ 3.8

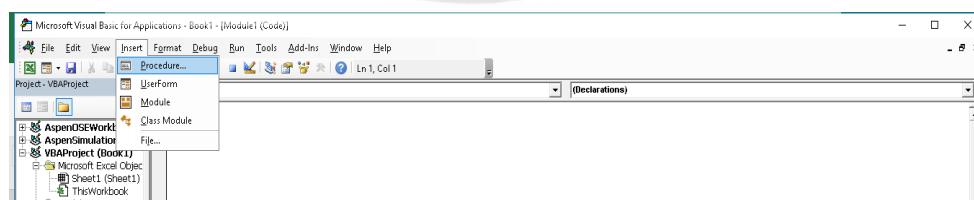


รูปที่ 3.8 หน้าต่างของ Visual Basic



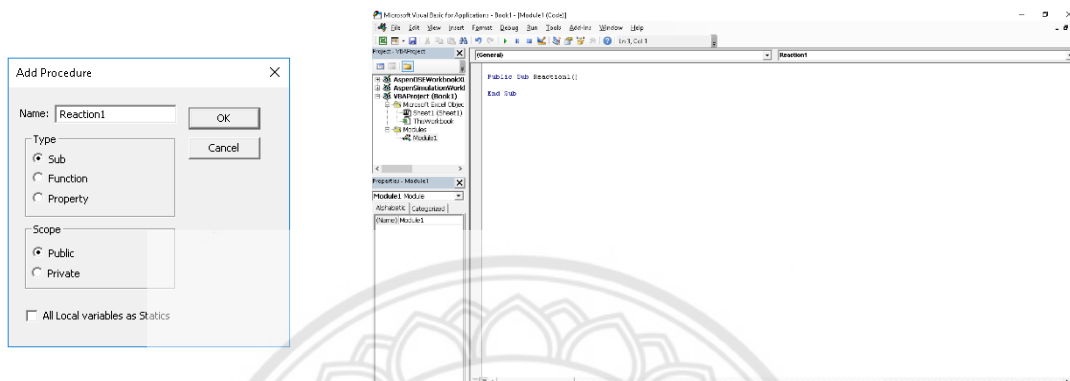
รูปที่ 3.9 หน้าต่างของ Module

(3) สร้างหน้าต่าง Procedure คลิกที่ Insert จากนั้นเลือก Procedure



รูปที่ 3.10 หน้าต่างของ Procedure

(4) ทำการตั้งชื่อ Procedure ขึ้นมา แล้วกด OK จะได้หน้าต่างการทำงานของ Procedure ขึ้นมา



รูปที่ 3.11 การตั้งชื่อ Procedure

(5) ทำการสร้าง Procedure และทดสอบโปรแกรม โดยทำการกดบนแถบเมนู เพื่อทำการประมวลผลข้อมูลออกมา

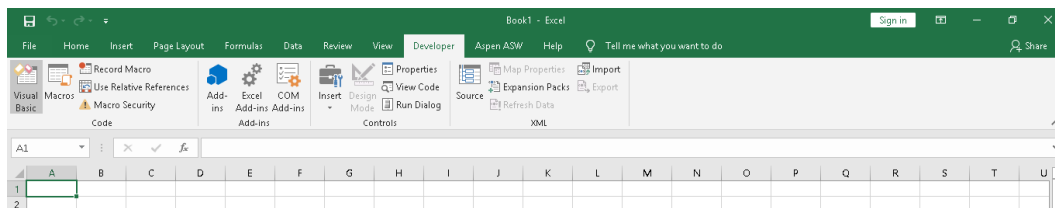


รูปที่ 3.12 แสดงแถบเครื่องมือประมวลผลทดสอบโปรแกรม

3.4 User form

ส่วนสำคัญของการสร้างโปรแกรมอีกส่วนหนึ่งก็คือ การสร้างฟอร์ม เพื่อทำการติดต่อระหว่างโปรแกรมกับผู้ใช้งาน การสร้างฟอร์มที่ดี และมีการจัดหมวดหมู่ของเครื่องมือต่างๆ ที่เป็นองค์ประกอบของฟอร์ม ให้เป็นระเบียบเรียบร้อยแล้ว จะช่วยให้โปรแกรมนั้นมีความน่าใช้ยิ่งขึ้น ในโปรแกรมเอ็กเซลล์นั้น เราสามารถสร้างฟอร์มขึ้นมาใช้งานได้ มีขั้นตอนในการสร้าง ดังนี้ [18]

(1) การสร้าง Uses Form ให้ไปที่ คลิก นักพัฒนา (Developer) เลือก Visual Basic



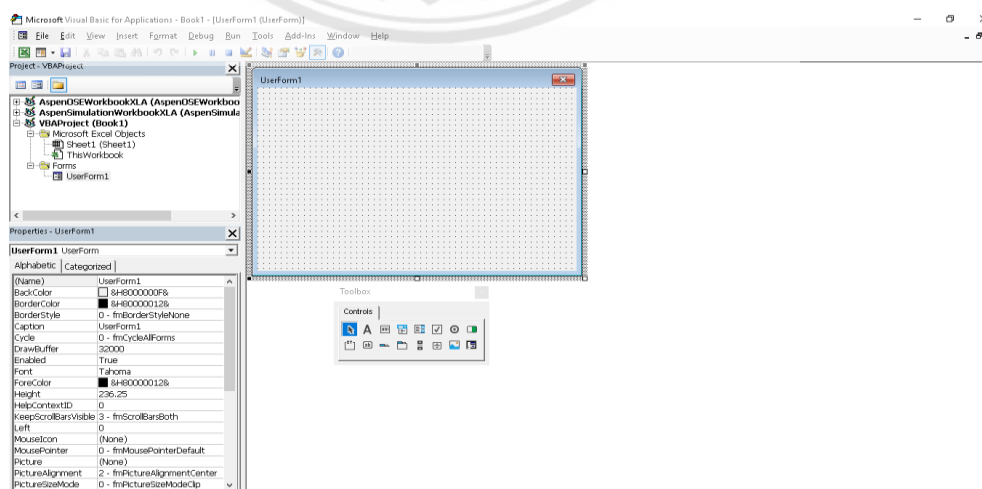
รูปที่ 3.13 การเปิดหน้าต่าง User Form

(2) คลิกที่ Insert จากนั้นเลือก UserForm



รูปที่ 3.14 หน้าต่างการสร้าง User Form

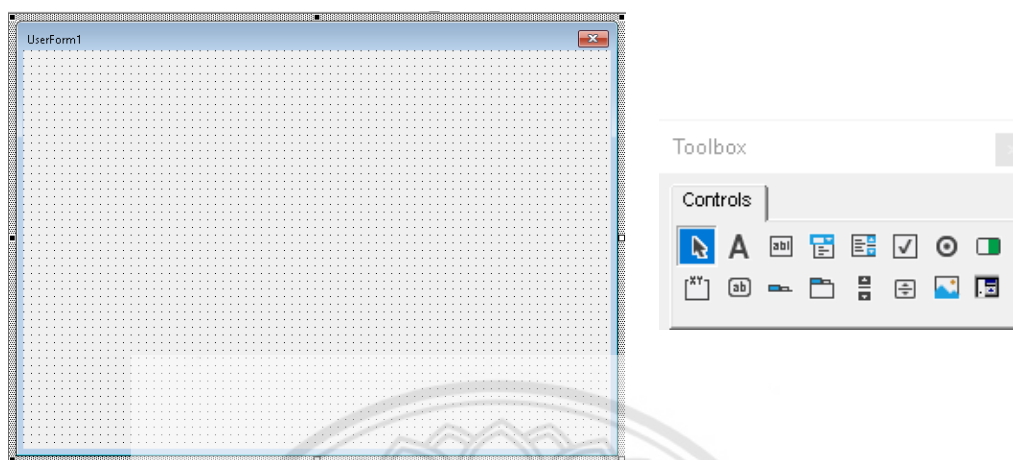
(3) หน้าต่าง User Form 1



รูปที่ 3.15 หน้าต่าง User Form 1

(4) หน้าต่าง UserForm1 มีส่วนประกอบต่างๆ ดังนี้

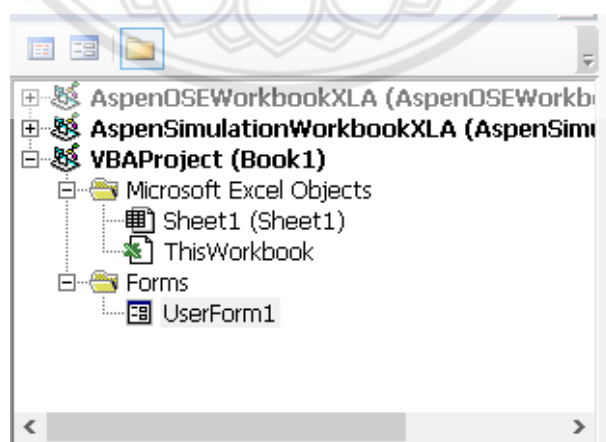
(4.1) UserForm1



รูปที่ 3.16 หน้าต่าง User Form 1

(4.2) Project Explorer

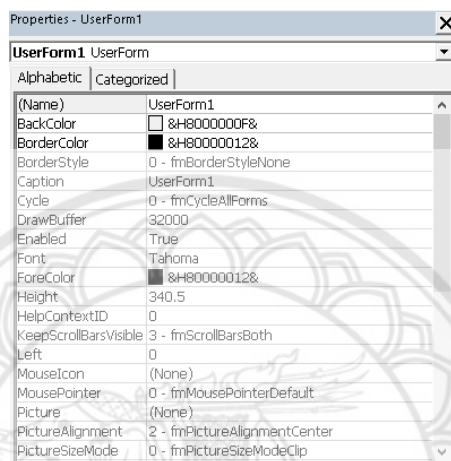
หน้าต่าง VBA Project Explorer เป็นส่วนที่ใช้ สำหรับจัดการเกี่ยวกับโปรเจค ทำหน้าที่แสดงส่วนประกอบต่างๆ ที่มีอยู่ในโปรเจค เช่น สมุดงาน ฟอรัม โมดูล ซึ่งผู้เขียนโปรแกรมสามารถเลือกใช้งานได้โดยการคลิกเลือกได้ [18]



รูปที่ 3.17 หน้าต่าง Project Explorer

(4.3) Properties window

หน้าต่าง คุณสมบัติ (property window) เป็นส่วนที่ใช้สำหรับกำหนดคุณสมบัติต่างๆ ให้กับวัตถุที่ถูกเลือก ดังนั้นหน้าต่างนี้จะมียังค์ประกอบของคุณสมบัติเปลี่ยนไปตามวัตถุต่างๆ สามารถใช้หน้าต่างนี้ ในการกำหนดค่าคุณสมบัติต่างๆของวัตถุ หรือคอนโทรลต่างๆ ได้อย่างเหมาะสม [18]

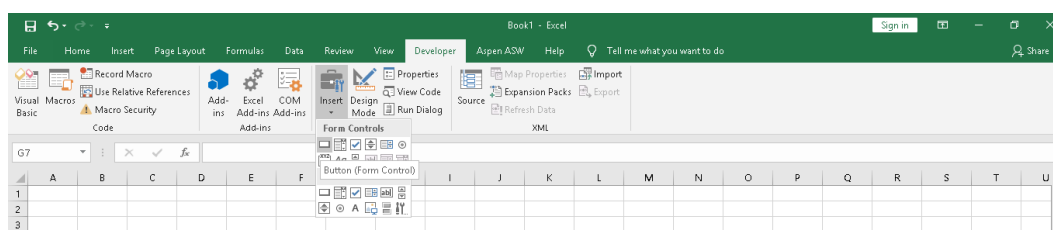


รูปที่ 3.18 หน้าต่าง Properties

3.5 Command Button

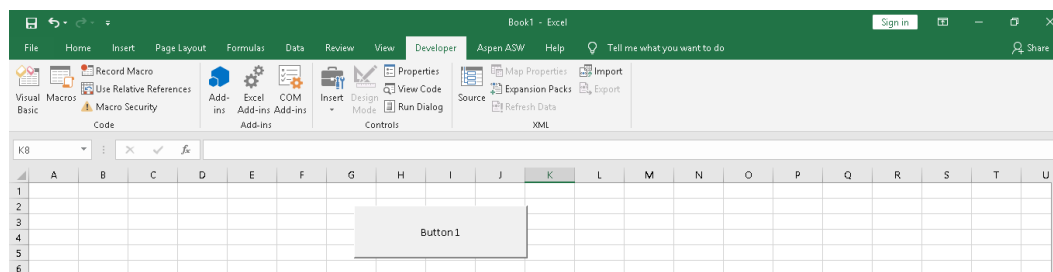
Command Button เป็นคอนโทรลสำหรับสร้างปุ่มคำสั่งบนฟอร์ม เพื่อใช้กำหนดรหัสคำสั่ง และสั่งให้โปรแกรมทำงาน [18]

(1) เปิดใช้งาน Command Button โดยคลิกที่ นักพัฒนา (Developer) คลิกที่ Insert จากนั้นเลือกปุ่ม Button (Form Control) จากนั้นทำการวาดปุ่มออกมา



รูปที่ 3.19 การสร้างปุ่ม Command Button

(2) เมื่อวาดเสร็จแล้ว จะได้หน้าต่างของปุ่ม Command Button ออกมาดังรูปที่ 3.19

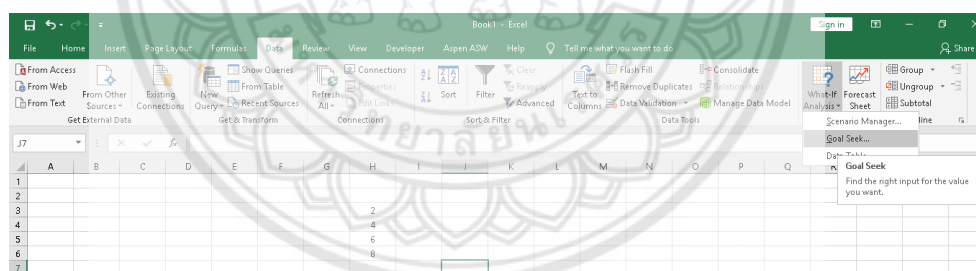


รูปที่ 3.20 ปุ่ม Command Button

3.6 Goal Seek

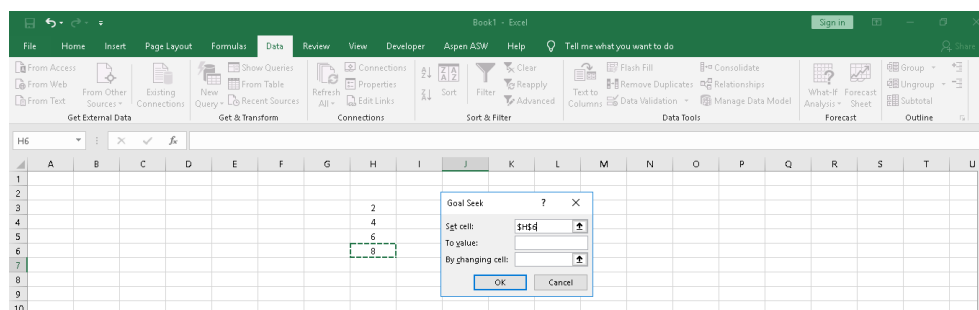
Excel จะมี Goal Seek ที่มีความสามารถในการทำให้บรรลุเป้าหมายที่กำหนดกฎเกณฑ์ไว้โดยการปรับค่าบางค่า [19]

(1) กำหนดค่าที่เราต้องการลงไปในช่วง Cell จากนั้นคลิกที่ ข้อมูล (Data) ทำการคลิก What-If Analysis แล้ว คลิกที่ Goal Seek...



รูปที่ 3.21 หน้าต่างการเปิด Goal Seek

(2) หน้าต่างการใช้งาน Goal Seek



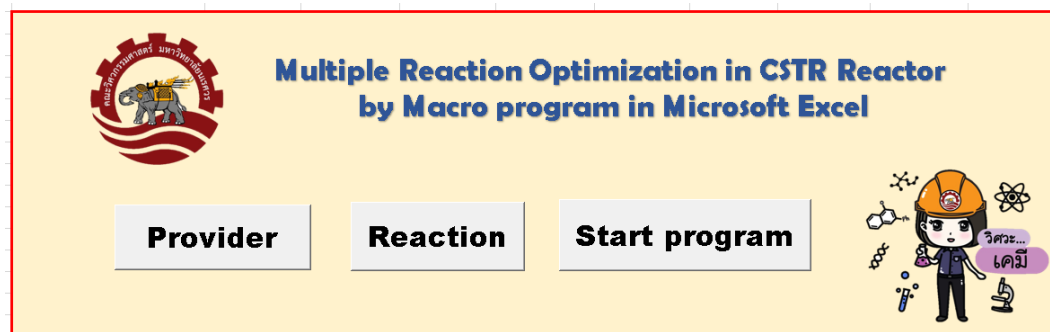
รูปที่ 3.22 หน้าต่างการใช้งาน Goal Seek

(3) เลือกค่าเป้าหมายหรือค่าที่ต้องการจะเปลี่ยนแปลง จากนั้นคลิก OK

3.7 การเขียนโปรแกรม (coding)

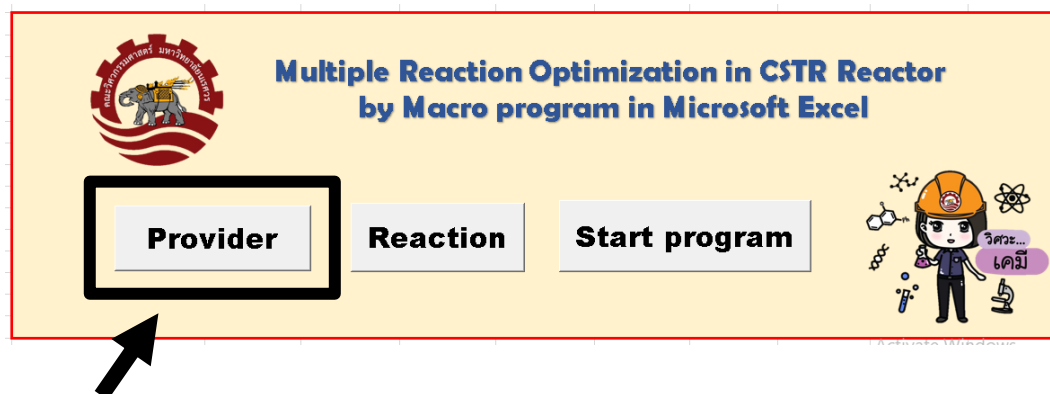
ในการเขียนโค้ดนั้น คณะผู้จัดทำได้นำฟังก์ชันต่างๆ มาใช้ในการเขียน Code ลงบน Microsoft excel เพื่อนำไปสร้างโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องสำหรับกระบวนการการสลายตัวของแอมโมเนีย โดยใช้ Macro Excel ร่วมกับ Visual Basic for Application (VBA) ในการเขียนโปรแกรม ตัวอย่าง code ที่ใช้ในการเขียนโปรแกรมเพื่อให้ทำงานตามที่ต้องการ มีดังต่อไปนี้

3.7.1 หน้าต่างเริ่มต้นของโปรแกรม



รูปที่ 3.23 หน้าต่างเริ่มต้นของโปรแกรม

3.7.2 หน้าต่างแนะนำผู้จัดทำ (ปุ่ม Provider)



รูปที่ 3.24 หน้าต่างปุ่ม Provider



รูปที่ 3.25 หน้าต่างแนะนำผู้จัดทำ

```
Sub Provider_Click()
```

```
UserForm1.Show
```

```
End Sub
```



```
Private Sub CommandButton1_Click()
```

```
Unload UserForm1
```

```
End Sub
```

3.7.3 หน้าต่างถึงปฏิกรณ์และสมการเคมี (ปุ่ม Reaction)

Multiple Reaction Optimization in CSTR Reactor
by Macro program in Microsoft Excel

Provider Reaction Start program

รูปที่ 3.26 หน้าต่างปุ่ม Reaction

UserForm3

CSTR Tank

Rate expressions

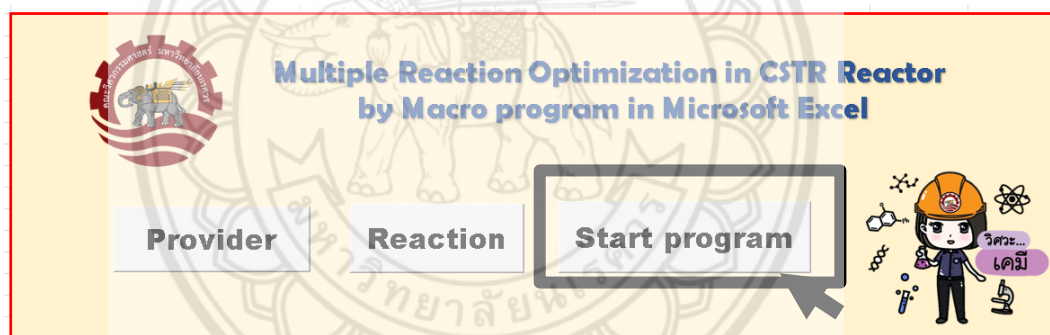
$NH_3 \longleftrightarrow \frac{1}{2}N_2 + \frac{3}{2}H_2$	$[-\Delta H_1 = -54.6 \text{ KJ/mol}]$
$3H_2 + CO \longleftrightarrow CH_4 + H_2O$	$[-\Delta H_2 = 206.0 \text{ KJ/mol}]$
$H_2 + CO_2 \longleftrightarrow CO + H_2O$	$[-\Delta H_3 = -41.0 \text{ KJ/mol}]$
$4H_2 + CO_2 \longleftrightarrow CH_4 + 2H_2O$	$[-\Delta H = 164.9 \text{ KJ/mol}]$

Exit

รูปที่ 3.27 หน้าต่างถึงปฏิกรณ์และสมการเคมี

```
Sub CSTR_Click()  
  
    UserForm3.Show  
  
End Sub  
  
Private Sub CommandButton1_Click()  
  
    Unload UserForm3  
  
End Sub
```

3.7.4 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม (ปุ่ม Start Program)



รูปที่ 3.28 หน้าต่าง ปุ่ม Start Program

UserForm2

CSTR Reactor design Program

Input data		Conversion	
Temperature	<input type="text"/>	K	XH ₂
Pressure	<input type="text"/>	bar	XCO
V CSTR	<input type="text"/>	m ³	XCO ₂
Inlet molar floe rate (gmole/sec)		XCH ₄	XH ₂ O
NH ₃	<input type="text"/>	N ₂	<input type="text"/>
H ₂	<input type="text"/>	CH ₄	<input type="text"/>
CO	<input type="text"/>	H ₂ O	<input type="text"/>
CO ₂	<input type="text"/>	Tout	<input type="text"/>
RUN		OK	
		Clear	Exit

รูปที่ 3.29 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม

```
Private Sub TextBox1_Change()
```

```
Range("D28").Value = TextBox1.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox2_Change()
```

```
Range("O30").Value = TextBox2.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox3_Change()
```

```
Range("C29").Value = TextBox3.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox4_Change()
```

```
Range("C36").Value = TextBox4.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox5_Change()
```

```
Range("C37").Value = TextBox5.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox6_Change()
```

```
Range("C38").Value = TextBox6.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox7_Change()
```

```
Range("C39").Value = TextBox7.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox8_Change()
```

```
Range("C40").Value = TextBox8.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox9_Change()
```

```
Range("C41").Value = TextBox9.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox10_Change()
```

```
Range("C42").Value = TextBox10.Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub CommandButton1_Click()
```

```
Range("B90:CY90").Select
```

```
Selection.AutoFill Destination:=Range("B90:CY12089")
```

```
Cells(1, 1).Select
```

```
Load UserForm2
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox10_Change()
```

```
TextBox11.Value = Cells(4, 17).Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox10_Change()
```

```
TextBox12.Value = Cells(4, 17).Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox10_Change()
```

```
TextBox13.Value = Cells(4, 17).Value
```

```
End Sub
```

```
Private Sub TextBox10_Change()
```

```
TextBox14.Value = Cells(4, 17).Value
```

End Sub
Private Sub TextBox10_Change() TextBox15.Value = Cells(4, 17).Value End Sub
Private Sub TextBox10_Change() TextBox16.Value = Cells(4, 17).Value End Sub
Private Sub CommandButton3_Click() TextBox11.Value = Cells(4, 17).Value TextBox12.Value = Cells(4, 18).Value TextBox13.Value = Cells(4, 19).Value TextBox14.Value = Cells(4, 20).Value TextBox15.Value = Cells(4, 21).Value TextBox16.Value = Cells(4, 22).Value End Sub
Private Sub CommandButton2_Click() Range("B91:CY12089").Select Selection.ClearContents End Sub
Private Sub CommandButton4_Click()

Unload UserForm2 End Sub
Private Sub TextBox1_Change() Rang("D28").Interior.Color = VbRed End Sub
Private Sub TextBox2_Change() Rang("O30").Interior.Color = VbRed End Sub
Private Sub TextBox3_Change() Rang("C29").Interior.Color = VbRed End Sub
Private Sub TextBox4_Change() Rang("C36").Interior.Color = VbRed End Sub
Private Sub TextBox5_Change() Rang("C37").Interior.Color = VbRed End Sub
Private Sub TextBox6_Change()

<pre>Rang("C38").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox7_Change()</pre> <pre>Rang("C39").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox8_Change()</pre> <pre>Rang("C40").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox9_Change()</pre> <pre>Rang("C41").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox10_Change()</pre> <pre>Rang("C42").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox11_Change()</pre> <pre>Rang("Q4").Interior.Color = VbRed</pre> <pre>End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox12_Change()</pre>

<pre>Rang("R4").Interior.Color = VbRed End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox13_Change() Rang("S4").Interior.Color = VbRed End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox14_Change() Rang("T4").Interior.Color = VbRed End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox15_Change() Rang("U4").Interior.Color = VbRed End Sub</pre>
<pre>Private Sub TextBox16_Change() Rang("V4").Interior.Color = VbRed End Sub</pre>
<pre>Private Sub ListBox1_Click() myPic = "D:\My Picture\" & ListBox1 & ".jpg" ListBox1.Picture = Load Picture (myPic) End Sub</pre>
<pre>Private Sub ListBox2_Click()</pre>

```
myPic = "D:\My Picture\" & ListBox1 & ".jpg"  
ListBox2.Picture = Load Picture (myPic)
```

End Sub

```
Private Sub ListBox3_Click()
```

```
myPic = "D:\My Picture\" & ListBox1 & ".jpg"  
ListBox4.Picture = Load Picture (myPic)
```

End Sub

```
Private Sub ListBox4_Click()
```

```
myPic = "D:\My Picture\" & ListBox1 & ".jpg"  
ListBox4.Picture = Load Picture (myPic)
```

End Sub

```
Private Sub ListBox5_Click()
```

```
myPic = "D:\My Picture\" & ListBox1 & ".jpg"  
ListBox5.Picture = Load Picture (myPic)
```

End Sub

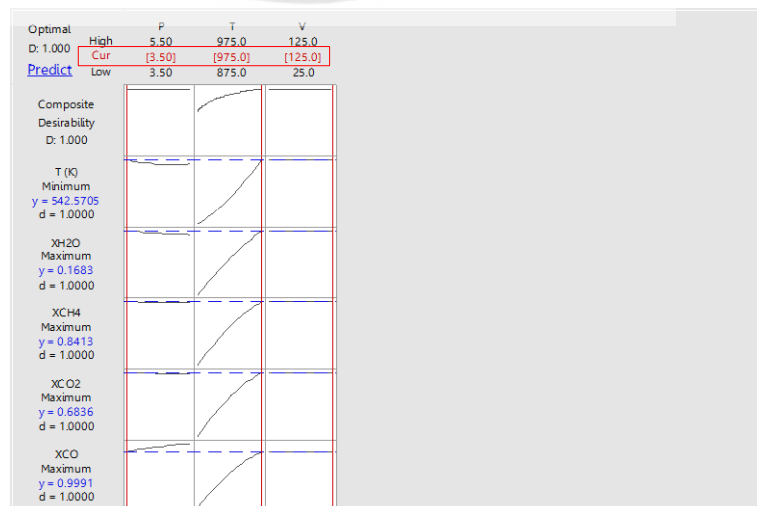
บทที่ 4

ผลการทดลองและวิเคราะห์ผลการทดลอง

งานวิจัยนี้ได้ทำการสร้างโปรแกรมออกแบบถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง โดยนำกระบวนการสลายแอมโมเนียมาใช้ในการศึกษา โดยได้ทำการวิเคราะห์ปัจจัยของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนจากกราฟ 3 มิติ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง

4.1 ผลการทดลองจากโปรแกรมเอกซ์เซล

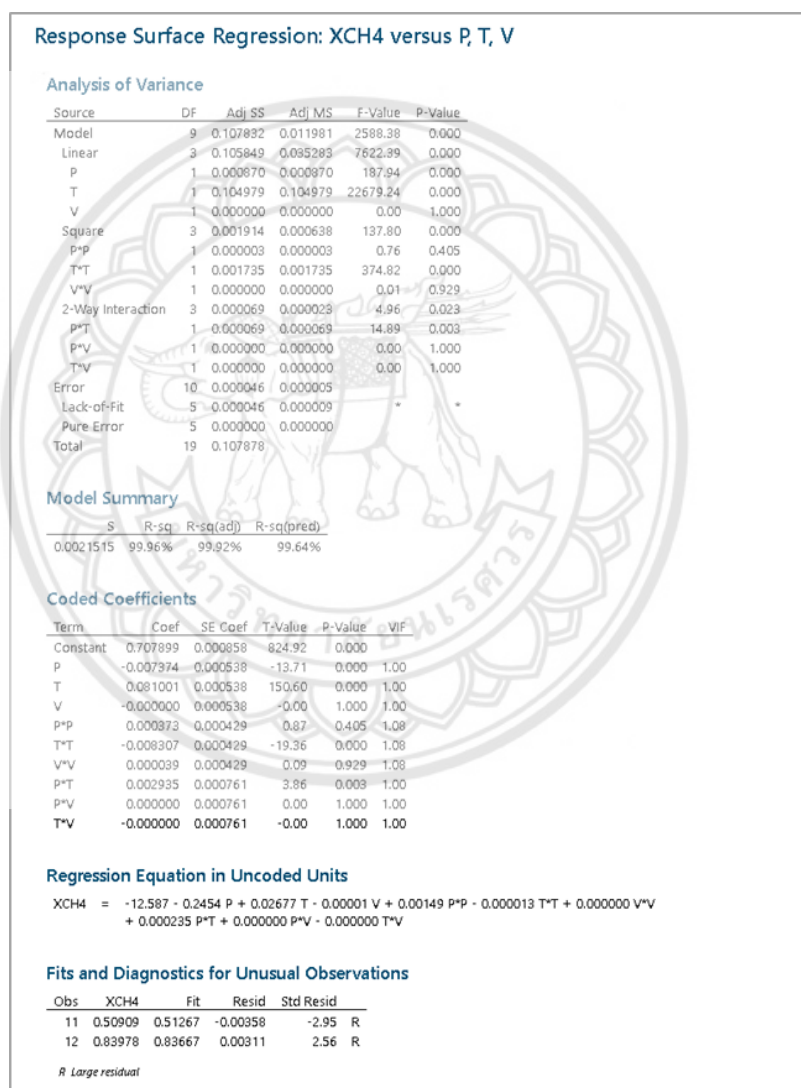
จากการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องสำหรับปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนียซึ่งจากงานวิจัยของ Fakhteh Siavashi และคณะ [25] ทำการทดลองการสลายตัวของแอมโมเนียโดยใช้เครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล (Plug Flow Reactor) ภายใต้สภาวะคงที่ (steady state) พบว่าที่อุณหภูมิเข้ามากกว่า 873 เคลวิน และความดัน 20-35 บาร์ ได้ ร้อยละการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน เท่ากับ 100 จากการออกแบบการเขียนโปรแกรมโดยใช้แมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง (CSTR) ภายใต้สภาวะไม่คงที่ (Unsteady state) ซึ่งการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนที่ได้ ไม่สามารถนำไปเปรียบเทียบกับงานวิจัยของ Fakhteh Siavashi และคณะ [25] รวมถึงงานวิจัยของ M.E.E.Abashar [4] เนื่องจากการทดลองที่ใช้เครื่องปฏิกรณ์และสภาวะที่ต่างกัน ดังนั้น ผู้วิจัยจึงได้ใช้โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมของการสลายตัวของแอมโมเนียในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้แสดงดังรูปที่ 4.1



รูปที่ 4.1 สภาวะที่เหมาะสม โดยใช้ฟังก์ชัน Response Optimization

จากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

จากรูปที่ 4.1 พบว่าสภาวะที่เหมาะสมสำหรับการสลายตัวของแอมโมเนียในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ได้อุณหภูมิเข้า 975 เคลวิน ความดัน 3.5 บาร์ และปริมาตร 125 ลูกบาศก์เมตร จะทำให้ได้การแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนที่ดีที่สุด



รูปที่ 4.2 ค่า P-Value และ ค่า R-Squared ที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน

จากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

จากรูปที่ 4.2 พิจารณา ค่า P-Value และ ค่า R-Squared ของมีเทน ถ้าค่า P-Value น้อยกว่า 0.05 หมายความว่าปัจจัย (อุณหภูมิ ความดัน ปริมาตร) มีนัยสำคัญต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน ซึ่งพบว่าอุณหภูมิและความดัน เป็นปัจจัยหลักที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน ส่วนปริมาตรถือเป็นปัจจัยรอง สำหรับ ค่า R-Squared หมายถึง ค่าสัมประสิทธิ์แสดงการตัดสินใจ ซึ่งถ้า ค่า R-Squared สูงถึง ร้อยละ 98.5 ถือว่าเป็นผลที่ดีมาก [26]

จากการหาสถานะที่เหมาะสมของการสลายตัวของแอมโมเนียในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ผลลัพธ์การหาสถานะที่เหมาะสม ที่ได้จากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) (อุณหภูมิ 975 เคลวิน ความดัน 3.5 บาร์ และปริมาตร 125 ลูกบาศก์เมตร) จะนำไปใช้ในการหาการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน โดยใช้แอมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล ซึ่งได้ร้อยละการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน เท่ากับ 98 ดังแสดงในรูปที่ 4.3

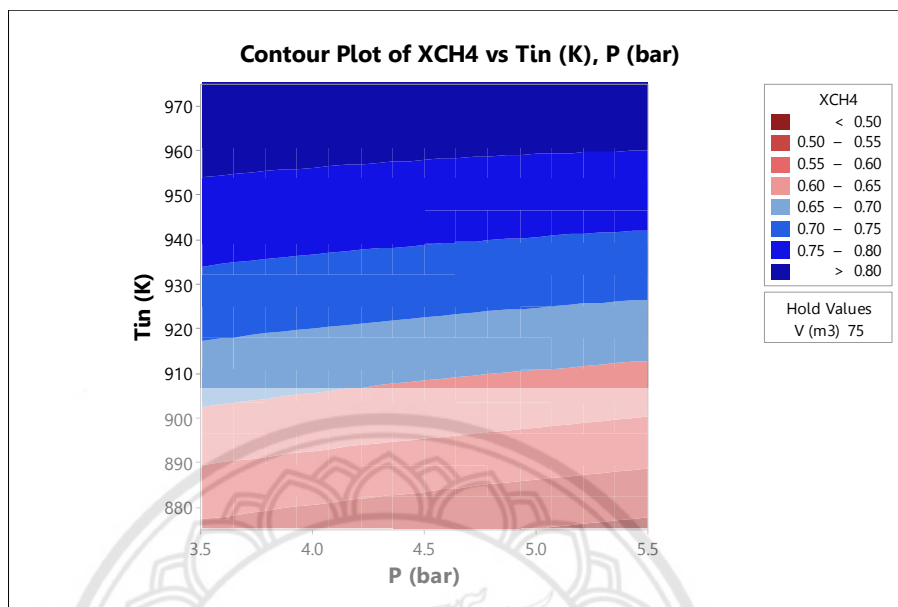
The screenshot shows a software interface titled "CSTR Reactor design Program". It is divided into several sections for data entry and results display.

Input data			Conversion		
Temperature	975	K	XH ₂	0.175448328918544	
Pressure	3.5	bar	XCO	0.999724088933973	
V CSTR	125	m ³	XCO ₂	0.970276203585001	
Inlet molar flow rate (gmole/sec)			XCH ₄	0.985000146259471	
NH ₃	10	N ₂	2	XH ₂ O	0.210739306275963
H ₂	2	CH ₄	6	Tout	585.146590784065
CO	3	H ₂ O	33		
CO ₂	3				

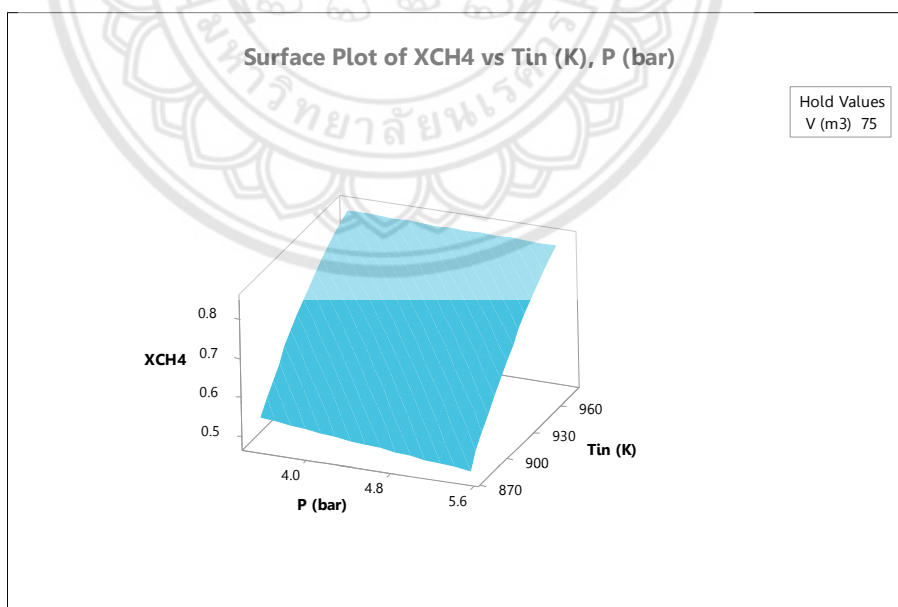
Buttons: OK, RUN, Clear, Exit

รูปที่ 4.3 ผลลัพธ์ที่ได้จากการเขียนโปรแกรมโดยแอมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

4.2 การวิเคราะห์อุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน



รูปที่ 4.4 ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน

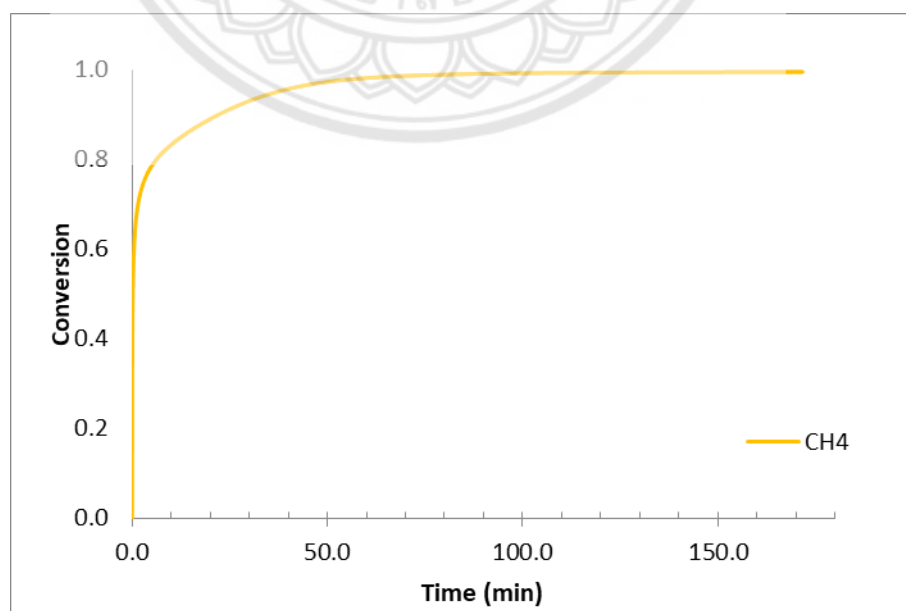


รูปที่ 4.5 แสดงความสัมพันธ์ของอุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion)

ของมีเทน ในรูปกราฟ 3 มิติ

จากการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของอุณหภูมิที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน พบว่า เมื่ออุณหภูมิเข้าสูงขึ้น การแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนจะมีค่าสูงขึ้นเช่นเดียวกัน เนื่องจากปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนีย เป็นปฏิกิริยาแบบดูดความร้อน ดังแสดงในสมการที่ 2.1 ซึ่งปฏิกิริยาดูดความร้อนนั้นอุณหภูมิจะมีผลอย่างมากในการเกิดปฏิกิริยา ซึ่งหากอุณหภูมิสูงขึ้นจะทำให้ปฏิกิริยาดำเนินไปข้างหน้ามากยิ่งขึ้น โดยอุณหภูมิที่เพิ่มขึ้นจะทำให้โมเลกุลของสารตั้งต้นเกิดการสลายตัวด้วยความร้อน (Thermal cracking) [27] และในขณะเดียวกันอุณหภูมิสูงทำให้โมเลกุลของสารในระบบจะมีพลังงานจลน์สูงขึ้น ทำให้เกิดการชนกันของโมเลกุลมากยิ่งขึ้น จึงสรุปได้ว่าอุณหภูมิถือเป็นปัจจัยหลักที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน [5] สำหรับการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน พบว่าที่ความดันต่ำจะทำให้ได้การแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนสูง จากงานวิจัยของ M.E.E. Abashar ทำให้ทราบว่าปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนีย (2.1) เป็นปฏิกิริยาที่ดำเนินไปข้างหน้า [4] หากใช้ความดันที่สูงมากๆ จะส่งผลให้ปฏิกิริยาเกิดการย้อนกลับ ทำให้ไม่เกิดการสลายตัวของแอมโมเนีย ดังนั้นความดันเป็นปัจจัยหลักที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนเช่นเดียวกับอุณหภูมิ ซึ่งเป็นไปตามหลักของ เลอ ชาเตอลิเอ [28]

4.3 วิเคราะห์ความสัมพันธ์ของเวลาที่ผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน



รูปที่ 4.6 ความสัมพันธ์ของการแปลงผัน (Conversion) กับเวลา ของมีเทน

จากกราฟรูปที่ 4.6 ความสัมพันธ์ของการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนกับเวลา พบว่าการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนแปรผันตรงกับเวลา โดยเมื่อเวลาที่ใช้ในการสลายตัวของแอมโมเนียในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องเพิ่มขึ้น จะส่งผลให้ค่าการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนเพิ่มมากขึ้นเช่นกัน เนื่องจากเมื่อปล่อยให้ปฏิกิริยาดำเนินไปตามเวลาที่เพิ่มขึ้น จะทำให้สารแต่ละตัวมีเวลาอยู่ในเครื่องปฏิกรณ์และทำปฏิกิริยากันได้นานขึ้น [27] ซึ่งในการเกิดปฏิกิริยาเคมีจะต้องมีการสัมผัสหรือการชนกันของโมเลกุลของสารเริ่มต้น ถ้าโมเลกุลชนกันด้วยความถี่ที่มากขึ้น ปฏิกิริยาก็คงเกิดได้เร็วขึ้นด้วย เมื่อปฏิกิริยาเกิดได้เร็วขึ้นและมีเวลาในการทำปฏิกิริยาในถังปฏิกรณ์เป็นเวลานาน จึงส่งผลให้ได้ค่าการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนเพิ่มขึ้น [5] แต่เมื่อเวลาผ่านไปเป็นเวลา 66 นาที จะเห็นว่าการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนที่ได้จะมีค่าคงที่หรือเริ่มเข้าสู่สมดุล (Steady state)



บทที่ 5

บทสรุปและข้อเสนอแนะ

งานวิจัยนี้ได้ทำการออกแบบโปรแกรมเพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมของเครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง ภายใต้สภาวะไม่คงที่ (Unsteady state) โดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลโดยได้ทำการวิเคราะห์อุณหภูมิ และความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน สามารถสรุปผลและข้อเสนอแนะได้ดังนี้

5.1 สรุปผลการดำเนินงาน

5.1.1 ศึกษาการหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

จากการศึกษาการหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง พบว่าการใช้แมโครโปรแกรม และ VBA (Visual basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลสามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้จริงทางด้านวิศวกรรม เนื่องจากง่ายต่อการใช้งาน ประหยัดเวลา ลดงบประมาณที่ใช้ในการศึกษาการทำการทดลอง และเพิ่มประสิทธิภาพในการทำงาน

5.1.2 เพื่อศึกษาและเรียนรู้ขั้นตอนและกระบวนการการเขียนโปรแกรมด้วยแมโคร และ VBA (Visual basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

จากการออกแบบการสร้างโปรแกรมด้วยแมโคร และ VBA (Visual basic for Applications) ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้สามารถนำไปประยุกต์ใช้งานได้จริง ทั้งนี้ต้องอยู่ภายใต้สมมติฐานที่กำหนดไว้

5.1.3 เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนีย ผ่านการออกแบบการเขียนโปรแกรมโดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

5.1.3.1 การวิเคราะห์อุณหภูมิและความดันที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน

จากการศึกษากระบวนการสลายตัวของแอมโมเนีย พบว่า อุณหภูมิ ความดัน และ ปริมาตรของสภาวะที่เหมาะสมในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง เท่ากับ 975 เคลวิน, 3.5 บาร์ และ 125 ลูกบาศก์เมตร ตามลำดับ ได้ร้อยละการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน เท่ากับ 98

5.1.3.2 วิเคราะห์ความสัมพันธ์ของเวลาที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน

จากการศึกษาความสัมพันธ์ของเวลาที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของ มีเทน พบว่าเมื่อปฏิกิริยาดำเนินไปการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน จะแปรผันตรงกับเวลา จนกระทั่งเวลาเวลาผ่านไปเป็นเวลา 66 นาที การแปลงผัน (Conversion) ของมีเทนจะเริ่มคงที่ และเริ่มเข้าสู่สมดุล (steady state)

5.2 ข้อเสนอแนะ

5.2.1 สำหรับงานวิจัยที่จะนำมาใช้ในการตรวจสอบความถูกต้องของการเขียนโปรแกรมด้วยแมโคร โปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล ควรอยู่ภายใต้สมมติฐานเดียวกัน เช่น ประเภทของเครื่องปฏิกรณ์ที่ใช้ ในการเขียนโปรแกรมควรเป็นชนิดเดียวกันกับงานวิจัยที่ใช้ตรวจสอบความถูกต้อง และสภาวะของระบบที่ใช้ในการศึกษาควรเป็นสภาวะเดียวกัน เป็นต้น

5.2.2 สำหรับผู้ที่สนใจศึกษาและใช้งานโปรแกรมครั้งแรกนั้น ควรศึกษาและทำตามคู่มือแนะนำการ ใช้โปรแกรม เพื่อให้ง่าย และสะดวกต่อการใช้งาน

5.2.3 สำหรับโปรแกรมที่จัดทำขึ้นในงานวิจัยนี้ ใช้เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมของการสลายตัวของ แอมโมเนียภายใต้สภาวะที่ไม่คงที่ และใช้เครื่องปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องเท่านั้น

5.2.4 ตัวอย่างการเขียนโปรแกรมในงานวิจัยเล่มนี้ อาจเป็นประโยชน์ต่อผู้ที่สนใจที่จะนำไปพัฒนา และประยุกต์ใช้งานต่อไป

เอกสารอ้างอิง

- [1] Merck, (1996). The Merck Index An Encyclopedia of Chemicals Drugs and Biologicals
Twelfth edition Budavari S. editor.
- [2] ดร.ปิยาณี ตั้งทองทวี. สมบัติทางเคมีและกายภาพของแอมโมเนีย
- [3] การสลายตัวของแอมโมเนีย. สืบค้นเมื่อวันที่ 19 สิงหาคม 2561 จาก
<http://th.generatorhjl.com/ammonia-decomposition-hydrogen-furnace/ammonia-decomposition-nitrogen-and-hydrogen.html>
- [4] M.E.E. Abashar. (2001). Integrated catalytic membrane reactors for decomposition of ammonia. Department of Chemical Engineering, College of Engineering, King Saud University, PO Box 800 , Riyadh 11421 , Saudi Arabia
- [5] นางสาวขวัญหทัย จิรเดชจร. (2554). เทคนิค TS-CM สำหรับข้อมูลทางจลนพลศาสตร์ที่สภาวะไม่คงตัวในถังปฏิกรณ์แบบถังกวนต่อเนื่อง: การศึกษาความถี่ในการเก็บข้อมูลและการลดสัญญาณรบกวนโดยดิจิตอลฟิลเตอร์ (TS-CM Technique for Transient Kinetic Study in CSTR: Sampling Frequency and Digital Noise Filtering). ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมเคมี มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
- [6] ลักษณะของพลังงานก่อกัมมันต์. สืบค้นเมื่อวันที่ 15 กันยายน 2561 จาก
http://119.46.166.126/self_all/selfaccess11/m5/chemistry5_2/lesson1/more/page12_5.php
- [7] ครูวิชัย ลิขิตพรักษ์. (2015). บทที่ 2 ปฏิริยาเคมี ม. 2. โรงเรียนศิลาจารพิพัฒน์. สืบค้นเมื่อวันที่ 15 กันยายน 2561 จาก <https://www.slideshare.net/meemahidol/2-2-48873855>
- [8] ปฏิริยาจุดและคายความร้อน. สืบค้นเมื่อวันที่ 15 กันยายน 2561 จาก
https://il.mahidol.ac.th/e-media/ap-chemistry2/kinetics/collision_theory.ht

- [9] ครูศิริรุทมิ บัวสมาน. (2015). **ปัจจัยที่มีผลต่ออัตราการเกิดปฏิกิริยา**. สืบค้นวันที่ 15 กันยายน 2561 จาก <https://www.slideshare.net/siricom4/5-56039793>
- [10] **จลนศาสตร์เคมี**. สาขาวิชาเคมี. โรงเรียนมหิตลนุสรณ์ (องค์การมหาชน). สืบค้นเมื่อวันที่ 9 ตุลาคม 2561 จาก www.mwit.ac.th/~t2040113/data/Kinetics/ChemicalKinetic.pdf
- [11] นางสาวกนกกาญจน์ ประทักษ์กุลวงศา และคณะผู้จัดทำ. (2011). **จลนศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์ (Chemical Engineering Kinetics And Reactor Design)**. ภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์. มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
- [12] Dr. Suttipong Songprawat. (2016). **Instructional Materials 312303 Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design**. Faculty of Engineering, Naresuan University
- [13] **Microsoft Excel และประโยชน์ของ Microsoft Excel**. สืบค้นเมื่อวันที่ 20 ตุลาคม 2561
- [14] ว่าที่ร้อยโท ณัฐศิระ เขาวสุต. (2004). **มือใหม่เริ่มเรียน ทัดเขียน Macro และ VBA บน Microsoft Excel**. บริษัท ซีเอ็ดดูเคชั่น จำกัด (มหาชน)
- [15] **ความผิดพลาด (Error) ที่สามารถเกิดขึ้นได้จากการเขียนโปรแกรม**. สืบค้นเมื่อวันที่ 27 ตุลาคม 2561 จาก <https://sites.google.com/site/masnukkabbthreiyxnlin/porkaerm-khxmphiwtxr/kar-trwc-sxb-khwam-thuk-txng-khxng-porkaerm>
- [16] Ama Kojo. (2014). **การเขียนโปรแกรมเบื้องต้น**. ภาควิชาวิทยาการคอมพิวเตอร์ คณะวิทยาศาสตร์. มหาวิทยาลัยขอนแก่น. สืบค้นเมื่อวันที่ 27 ตุลาคม 2561 จาก <https://www.slideserve.com/ama/4568176>
- [17] นางสาวปรีญา เสนา. **บทเรียน วิชาเทคโนโลยีสารสนเทศ 2 ด้วย wordpress**. สืบค้นเมื่อวันที่ 27 ตุลาคม 2561 จาก <https://dekinter2010.wordpress.com>
- [18] รัฐพล พัฒนศิริ. **บทที่ 6 การสร้าง User Form**. Medical Engineering คณะวิศวกรรมศาสตร์. มหาวิทยาลัยธรรมศาสตร์. สืบค้นเมื่อวันที่ 10 พฤษภาคม 2561 สืบค้นจาก <http://mpa-r1.blogspot.com/2011/05/6-user-form.html>
- [19] **การวิเคราะห์ข้อมูลด้วย GOAL SEEK ใน Excel**. สืบค้นเมื่อวันที่ 10 พฤษภาคม 2561 จาก http://socialintegrated.com/excel_optimize_a_result_with_goal_seek

- [20] M.E.E. Abashar. (2002). **Investigation of low temperature decomposition of ammonia using spatially patterned catalytic membrane reactors.** Department of Chemical Engineering, College of Engineering, King Saud University, P.O. Box 800, Riyadh 11421, Saudi Arabia
- [21] Shreya Mukherjee. (2017). **Low-temperature ammonia decomposition catalysts for hydrogen generation.** Department of Chemical and Biological Engineering, University at Buffalo, The State University of New York, Buffalo, NY 14260, United States
- [22] อุณาโลม เวทย์วัฒน์นะ. **การศึกษาการสังเคราะห์แอมโมเนียบนตัวเร่งปฏิกิริยาประเภทเหล็กโดยการใช้แบบจำลอง Aspen Plus®.** หลักสูตรวิศวกรรมเคมีและกระบวนการ บัณฑิตวิทยาลัย วิศวกรรมศาสตรมหาชาติสิรินธร ไทย-เยอรมัน. มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ
- [23] Kelvin W.W. (2010). **Teaching Excel VBA as a problem solving tool for chemical engineering core courses.** Chemical & Biomolecular Engineering, HKUST, Hong Kong
- [24] Josue Villesca และคณะ. **Reactor Project: Ammonia Synthesis by ASPEN Simulation.**
- [25] Fakhteh Siavashi. (2014). **Purge gas recovery of ammonia synthesis plant by integrated configuration of catalytic hydrogen-permselective membrane reactor and solid oxide fuel cell as a novel technology.** Department of Chemical Engineering, School of Chemical and Petroleum Engineering, Shiraz University, Shiraz 71345, Iran
- [26] **Regression Analysis: How Do I Interpret R-squared and Assess the Goodness-of-Fit?** สืบค้นเมื่อวันที่ 17 เมษายน 2562 จาก <https://blog.minitab.com/blog/adventures-in-statistics-2/regression-analysis-how-do-i-interpret-r-squared-and-assess-the-goodness-of-fit>
- [27] ลักขมี พยัตติกุล. **การผลิตก๊าซไฮโดรเจนจากกระบวนการเปลี่ยนรูปก๊าซไบโอมีเทน อัดด้วยไอน้ำ โดยใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาแพลเลเดียมบนตัวรองรับอะลูมินา ภายใต้สภาวะอุณหภูมิต่ำ (Hydrogen Production from Compressed Bio-methane Gas by Steam Reforming Process with**

Alumina-supported Palladium Catalyst (Pd/Al₂O₃) under Low Temperature Condition). ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเชียงใหม่

[28] หลักการของเลอ ชาเตอริเอ. สืบค้นเมื่อวันที่ 19 พฤษภาคม 2562 จาก

<https://lovechemistry5.wordpress.com/2013/09/07/5->

[%E0%B8%AB%E0%B8%A5%E0%B8%B1%E0%B8%81%E0%B9%80%E0%B8%A5%E0%B8%AD%E0%B8%8A%E0%B8%B2%E0%B9%80%E0%B8%95%E0%B8%AD%E0%B8%A5%E0%B8%B4%E0%B9%80%E0%B8%AD/?fbclid=IwAR1ThvzaR_VFS0QeKEU4nWafL_LZHacn8k8hlu bGHGxDeyKUivcJslUbAcQ](https://lovechemistry5.wordpress.com/2013/09/07/5-%E0%B8%AB%E0%B8%A5%E0%B8%B1%E0%B8%81%E0%B9%80%E0%B8%A5%E0%B8%AD%E0%B8%8A%E0%B8%B2%E0%B9%80%E0%B8%95%E0%B8%AD%E0%B8%A5%E0%B8%B4%E0%B9%80%E0%B8%AD/?fbclid=IwAR1ThvzaR_VFS0QeKEU4nWafL_LZHacn8k8hlu bGHGxDeyKUivcJslUbAcQ)

[29] ดร.จรัล ทรัพย์เสรี.(2009). DOE ตอน Central Composite Design.

[30] Dr. Warisa Wisittipanich. Computer Applications for Industrial Engineering (Minitab).

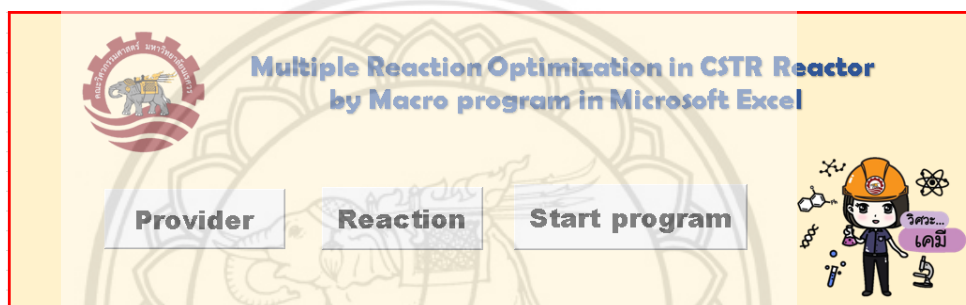




ก. คู่มือแนะนำการใช้งานโปรแกรม

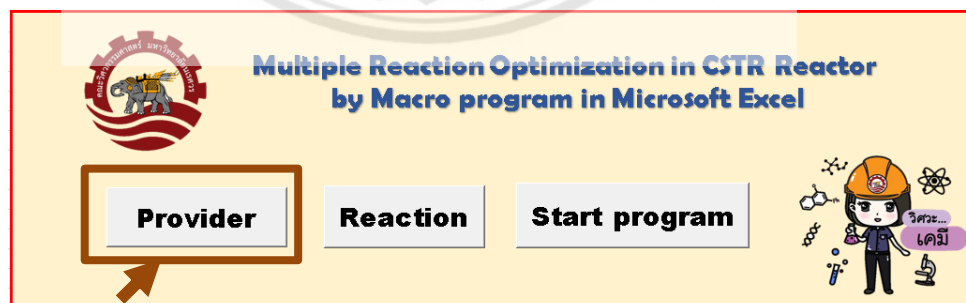
คู่มือแนะนำการใช้งานโปรแกรม การหาสภาวะที่เหมาะสมของปฏิกิริยาหลายขั้นตอนในถังปฏิกรณ์แบบต่อเนื่อง สำหรับกระบวนการสลายตัวของแอมโมเนีย โดยแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์ เอกซ์เซล จัดทำขึ้นเพื่อให้เข้าใจ และสามารถใช้งานโปรแกรมได้อย่างสะดวก สำหรับผู้ที่สนใจศึกษา

ในส่วนของหน้าต่างเริ่มต้นการใช้งานโปรแกรม เมื่อผู้ใช้งานเปิดโปรแกรมขึ้นมา จะแสดงได้ดังรูปที่ ก.1



รูปที่ ก.1 หน้าต่างเริ่มต้นโปรแกรม

ปุ่ม Provider จะเป็นหน้าต่างแนะนำคณะผู้จัดทำออกแบบการเขียนโปรแกรม ซึ่งเมื่อทำการคลิกที่ปุ่ม ในรูปที่ ก.2 จะแสดงผลลัพธ์ ดังรูปที่ ก.3



รูปที่ ก.2 หน้าต่างปุ่ม Provider

UserForm1



PROJECT ADVISOR : AJAN Dr. Suttipong Songprawat (Ph.D.)
 During my high school life, I studied at Triam Udom Suksa School, which is top one high school in Thailand and I was the Physics Olympic student in Thailand. I graduated my Bachelor Degree with the 1st Class Honor (Summa cum laude) with "Gold Honor Medal" in Chemical Engineering field and Master Degree in Petrochemical Technology from Chulalongkorn University. Moreover, I graduated another Master Degree and Ph.D. Degree with GPA 4.00 and 2 Honor Awards in Chemical Engineering from Illinois Institute of Technology (IIT), Chicago IL USA.

ผู้ดำเนินโครงการ



นางสาววีรวรรณ แซ่ชื่อ รหัสบัตร 58366221
 สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม
 คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตร
 E-mail : weerawan39@gmail.com

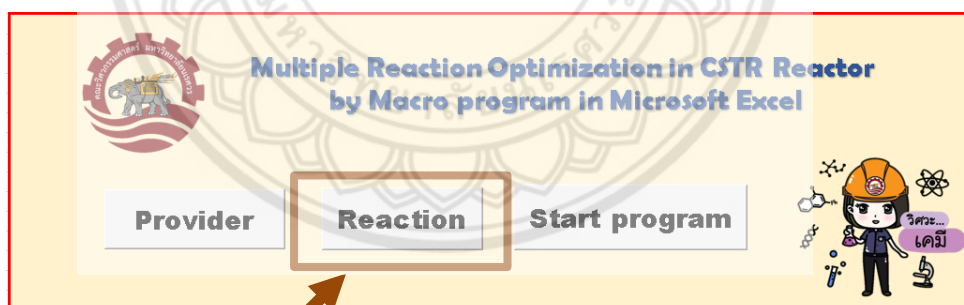


นางสาวมากริษา เมืองเดช รหัสบัตร 58366177
 สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมอุตสาหกรรม
 คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตร
 E-mail : sandrisa2609@gmail.com

Exit

รูปที่ ก.3 หน้าต่างแนะนำผู้จัดทำ

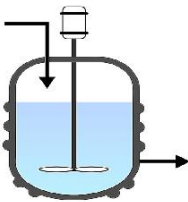
ปุ่ม Reaction จะเป็นหน้าต่างแสดงถึงปฏิกรณ์แบบต่อเนื่องและสมการเคมีที่ใช้ในการโปรแกรม ซึ่งเมื่อทำการคลิกที่ปุ่ม Reaction ดังรูปที่ ก.4 จะแสดงผลลัพธ์ ดังรูปที่ ก.5



รูปที่ ก.4 หน้าต่างปุ่ม Reaction

UseForm3 ×

CSTR Tank



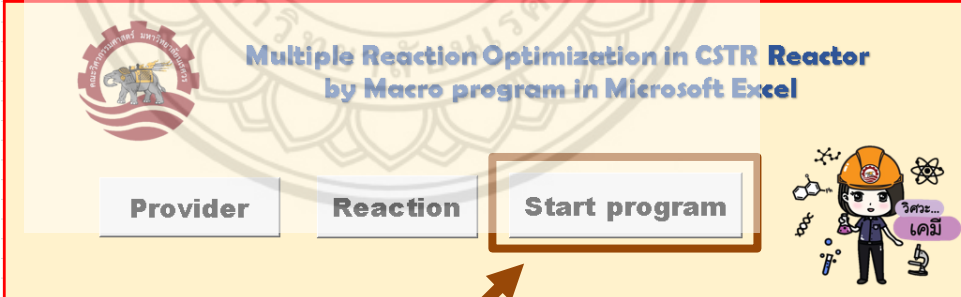
Rate expressions

$NH_3 \longleftrightarrow \frac{1}{2}N_2 + \frac{3}{2}H_2$	$[-\Delta H_1 = -54.6 \text{ KJ/mol}]$
$3H_2 + CO \longleftrightarrow CH_4 + H_2O$	$[-\Delta H_2 = 206.0 \text{ KJ/mol}]$
$H_2 + CO_2 \longleftrightarrow CO + H_2O$	$[-\Delta H_3 = -41.0 \text{ KJ/mol}]$
$4H_2 + CO_2 \longleftrightarrow CH_4 + 2H_2O$	$[-\Delta H = 164.9 \text{ KJ/mol}]$

Exit

รูปที่ ก.5 หน้าต่างถึงปฏิกิริยาและสมการเคมี

ปุ่ม Start program เป็นหน้าต่างเริ่มโปรแกรม ซึ่งเมื่อเราทำการคลิกที่ปุ่ม Start program ดังรูปที่ ก.6 จะแสดงผลลัพธ์ ดังรูปที่ ก.7



Multiple Reaction Optimization in CSTR Reactor by Macro program in Microsoft Excel

Provider Reaction **Start program**

วิเคราะห์... เคมี

รูปที่ ก.6 หน้าต่าง ปุ่ม Start Program

The screenshot shows a software interface for CSTR reactor design. It features two main input panels. The 'Input data' panel on the left contains fields for Temperature (K), Pressure (bar), and V CSTR (m3). Below these are fields for the inlet molar flow rates of various gases: NH3, N2, H2, CH4, CO, H2O, and CO2. A prominent yellow 'RUN' button is located at the bottom of this panel. The 'Conversion' panel on the right contains fields for the conversion of each gas (XH2, XCO, XCO2, XCH4, XH2O) and the total conversion (Tout). A red 'OK' button is positioned at the bottom of this panel. At the bottom right of the entire window, there are 'Clear' and 'Exit' buttons.

รูปที่ ก.7 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม

จากรูปที่ ก.7 หน้าต่างเริ่มโปรแกรม แบ่งเป็นส่วนของการป้อนข้อมูลขาเข้า เมื่อป้อนข้อมูลเรียบร้อยแล้ว ให้ทำการคลิกที่ปุ่ม RUN โปรแกรมจะทำการประมวลผลของข้อมูล และอีกส่วนจะแสดงผลลัพธ์ เมื่อทำการคลิกที่ปุ่ม OK จะแสดงผลของอุณหภูมิขาออก และการแปลงผัน (Conversion) ของสาร

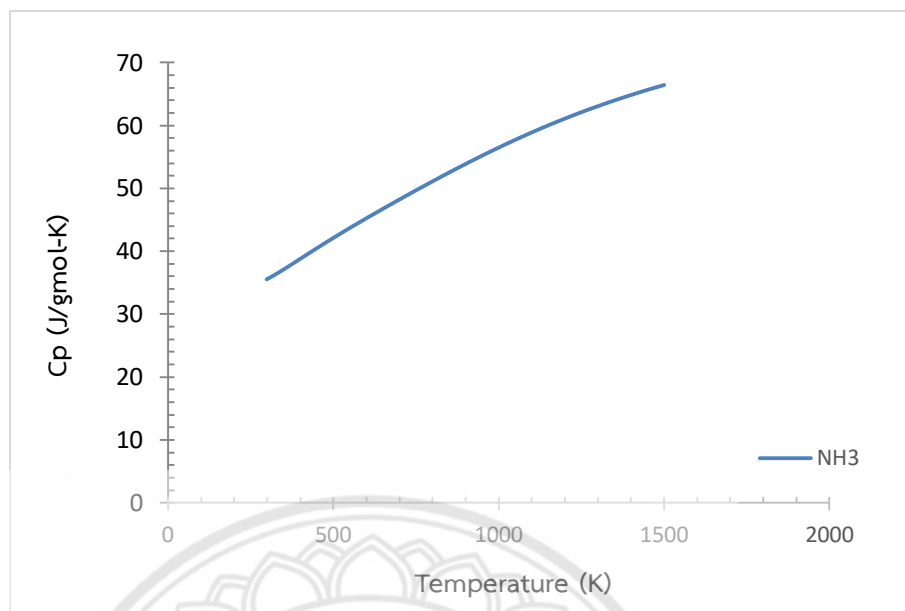


ตารางที่ ข.1 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของแอมโมเนียที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	8.4920	35.5305
322.19	8.6611	36.2380
346.22	8.8432	37.0000
370.26	9.0332	37.7950
394.30	9.2271	38.6060
418.34	9.4217	39.4204
442.37	9.6151	40.2297
466.41	9.8061	41.0289
490.45	9.9942	41.8155
514.48	10.1790	42.5891
538.52	10.3609	43.3502
562.56	10.5401	44.0999
586.59	10.7169	44.8396
610.63	10.8917	45.5708
634.67	11.0647	46.2946
658.71	11.2361	47.0120
682.74	11.4062	47.7236
706.78	11.5750	48.4297
730.82	11.7424	49.1304
754.85	11.9086	49.8255
778.89	12.0733	50.5148
802.93	12.2366	51.1977
826.96	12.3981	51.8737
851.00	12.5579	52.5423
875.04	12.7158	53.2027
899.08	12.8715	53.8544

ตารางที่ ข.1 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	13.0250	54.4967
947.15	13.1762	55.1291
971.19	13.3248	55.7510
995.22	13.4709	56.3621
1019.26	13.6142	56.9619
1043.30	13.7548	57.5500
1067.33	13.8925	58.1261
1091.37	14.0273	58.6901
1115.41	14.1592	59.2419
1139.45	14.2880	59.7812
1163.48	14.4139	60.3079
1187.52	14.5369	60.8222
1211.56	14.6568	61.3240
1235.59	14.7738	61.8134
1259.63	14.8878	62.2904
1283.67	14.9989	62.7553
1307.70	15.1071	63.2080
1331.74	15.2125	63.6489
1355.78	15.3151	64.0782
1379.82	15.4149	64.4959
1403.85	15.5120	64.9023
1427.89	15.6065	65.2978
1451.93	15.6985	65.6824
1475.96	15.7879	66.0565
1500.00	15.8748	66.4203



รูปที่ ข.1 ความจุความร้อนจำเพาะของแอมโมเนียในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K



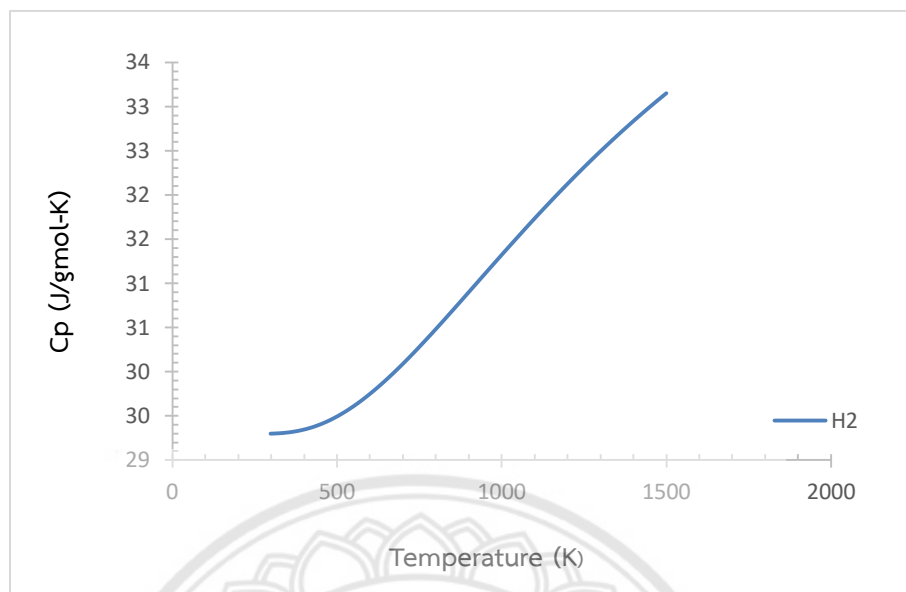
ตารางที่ ข.2 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของไฮโดรเจนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	7.0025	29.2985
322.19	7.0035	29.3026
346.22	7.0053	29.3102
370.26	7.0082	29.3224
394.30	7.0124	29.3400
418.34	7.0181	29.3638
442.37	7.0253	29.3939
466.41	7.0341	29.4306
490.45	7.0444	29.4739
514.48	7.0563	29.5237
538.52	7.0697	29.5796
562.56	7.0845	29.6415
586.59	7.1006	29.7089
610.63	7.1179	29.7814
634.67	7.1364	29.8587
658.71	7.1559	29.9401
682.74	7.1762	30.0254
706.78	7.1974	30.1140
730.82	7.2193	30.2055
754.85	7.2418	30.2995
778.89	7.2647	30.3956
802.93	7.2881	30.4935
826.96	7.3118	30.5927
851.00	7.3358	30.6929
875.04	7.3599	30.7940
899.08	7.3842	30.8954

ตารางที่ ข.2 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	7.4085	30.9971
947.15	7.4328	31.0988
971.19	7.4570	31.2002
995.22	7.4812	31.3013
1019.26	7.5052	31.4017
1043.30	7.5290	31.5014
1067.33	7.5526	31.6002
1091.37	7.5760	31.6980
1115.41	7.5991	31.7947
1139.45	7.6220	31.8903
1163.48	7.6445	31.9845
1187.52	7.6667	32.0775
1211.56	7.6886	32.1690
1235.59	7.7101	32.2591
1259.63	7.7313	32.3478
1283.67	7.7521	32.4349
1307.70	7.7726	32.5206
1331.74	7.7927	32.6047
1355.78	7.8124	32.6872
1379.82	7.8318	32.7682
1403.85	7.8508	32.8476
1427.89	7.8694	32.9255
1451.93	7.8876	33.0019
1475.96	7.9055	33.0767
1500.00	7.9230	33.1500

ที่มา : Aspen Plus V 8.8 User Interface



รูปที่ ข.2 ความจุความร้อนจำเพาะของไฮโดรเจนในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

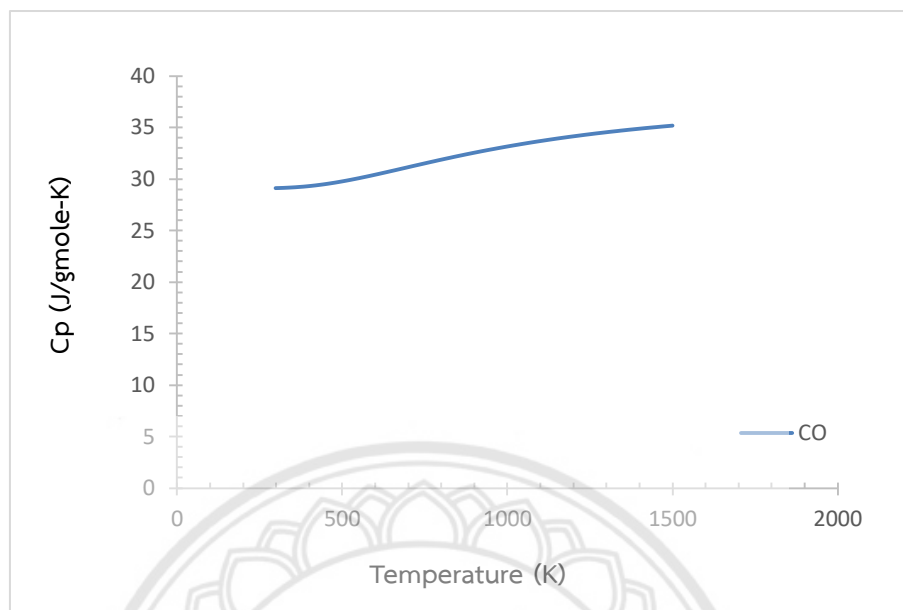


ตารางที่ ข.3 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของคาร์บอนมอนอกไซด์ที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmol-K)
298.15	6.9594	29.1182
322.19	6.9655	29.1435
346.22	6.9744	29.1809
370.26	6.9867	29.2323
394.30	7.0026	29.2990
418.34	7.0223	29.3814
442.37	7.0457	29.4793
466.41	7.0727	29.5921
490.45	7.1029	29.7184
514.48	7.1359	29.8568
538.52	7.1715	30.0057
562.56	7.2092	30.1634
586.59	7.2486	30.3282
610.63	7.2893	30.4984
634.67	7.3309	30.6725
658.71	7.3731	30.8491
682.74	7.4156	31.0271
706.78	7.4582	31.2052
730.82	7.5006	31.3826
754.85	7.5426	31.5584
778.89	7.5841	31.7320
802.93	7.6250	31.9029
826.96	7.6650	32.0705
851.00	7.7042	32.2345
875.04	7.7425	32.3947
899.08	7.7798	32.5509

ตารางที่ ข.3 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmol-K)
923.11	7.8162	32.7028
947.15	7.8515	32.8505
971.19	7.8857	32.9938
995.22	7.9189	33.1327
1019.26	7.9511	33.2673
1043.30	7.9822	33.3976
1067.33	8.0124	33.5237
1091.37	8.0415	33.6456
1115.41	8.0697	33.7634
1139.45	8.0969	33.8773
1163.48	8.1232	33.9873
1187.52	8.1485	34.0935
1211.56	8.1731	34.1961
1235.59	8.1967	34.2952
1259.63	8.2196	34.3908
1283.67	8.2417	34.4831
1307.70	8.2630	34.5723
1331.74	8.2836	34.6584
1355.78	8.3034	34.7415
1379.82	8.3226	34.8218
1403.85	8.3411	34.8994
1427.89	8.3591	34.9743
1451.93	8.3764	35.0466
1475.96	8.3931	35.1166
1500.00	8.4092	35.1842



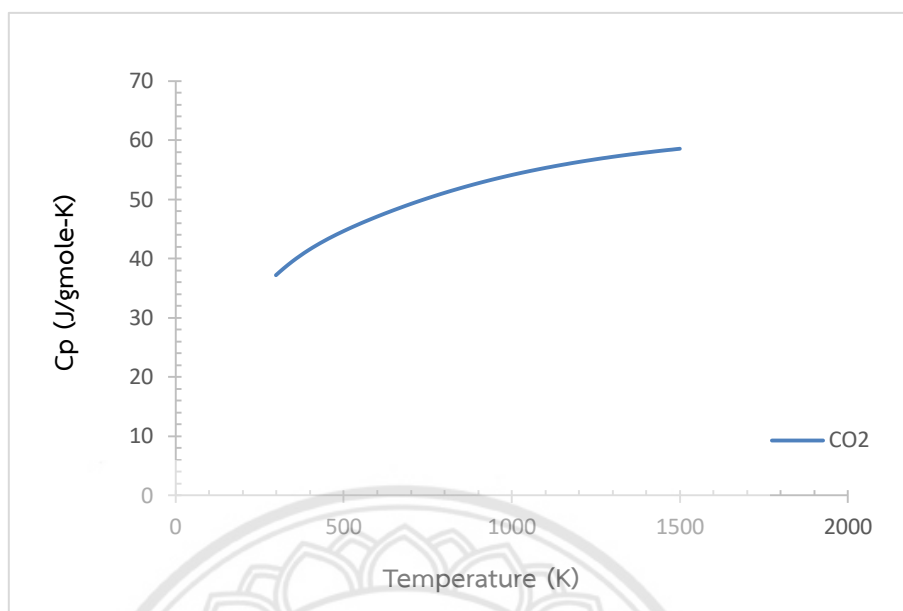
รูปที่ ข.3 ความจุความร้อนจำเพาะของคาร์บอนมอนอกไซด์ในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

ตารางที่ ข.4 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของคาร์บอนไดออกไซด์ที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	8.8954	37.2184
322.19	9.1807	38.4119
346.22	9.4425	39.5074
370.26	9.6813	40.5065
394.30	9.8992	41.4181
418.34	10.0989	42.2537
442.37	10.2834	43.0255
466.41	10.4553	43.7448
490.45	10.6169	44.4210
514.48	10.7701	45.0620
538.52	10.9163	45.6738
562.56	11.0566	46.2609
586.59	11.1919	46.8267
610.63	11.3226	47.3736
634.67	11.4491	47.9031
658.71	11.5718	48.4164
682.74	11.6907	48.9141
706.78	11.8061	49.3966
730.82	11.9179	49.8644
754.85	12.0262	50.3176
778.89	12.1310	50.7563
802.93	12.2325	51.1807
826.96	12.3306	51.5910
851.00	12.4253	51.9874
875.04	12.5167	52.3700
899.08	12.6050	52.7391

ตารางที่ ข.4 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	12.6900	53.0950
947.15	12.7720	53.4380
971.19	12.8510	53.7684
995.22	12.9270	54.0866
1019.26	13.0002	54.3928
1043.30	13.0706	54.6875
1067.33	13.1384	54.9711
1091.37	13.2036	55.2438
1115.41	13.2663	55.5062
1139.45	13.3266	55.7586
1163.48	13.3846	56.0013
1187.52	13.4404	56.2348
1211.56	13.4941	56.4593
1235.59	13.5457	56.6753
1259.63	13.5954	56.8831
1283.67	13.6432	57.0830
1307.70	13.6892	57.2754
1331.74	13.7334	57.4606
1355.78	13.7760	57.6388
1379.82	13.8170	57.8105
1403.85	13.8565	57.9757
1427.89	13.8946	58.1349
1451.93	13.9312	58.2882
1475.96	13.9665	58.4360
1500.00	14.0006	58.5785



รูปที่ ข.4 ความจุความร้อนจำเพาะของคาร์บอนไดออกไซด์ในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

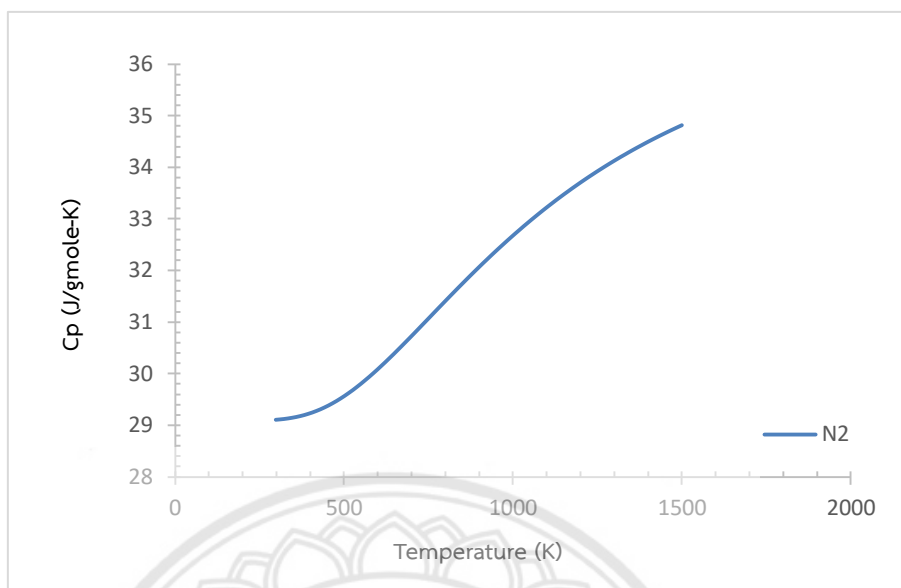


ตารางที่ ข.5 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของไนโตรเจนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	6.9566	29.1065
322.19	6.9603	29.1219
346.22	6.9658	29.1451
370.26	6.9736	29.1777
394.30	6.9841	29.2214
418.34	6.9974	29.2772
442.37	7.0138	29.3458
466.41	7.0333	29.4272
490.45	7.0558	29.5213
514.48	7.0811	29.6274
538.52	7.1091	29.7445
562.56	7.1395	29.8717
586.59	7.1720	30.0077
610.63	7.2063	30.1512
634.67	7.2421	30.3009
658.71	7.2791	30.4556
682.74	7.3169	30.6141
706.78	7.3555	30.7753
730.82	7.3944	30.9381
754.85	7.4335	31.1018
778.89	7.4726	31.2654
802.93	7.5115	31.4282
826.96	7.5501	31.5897
851.00	7.5883	31.7494
875.04	7.6259	31.9067
899.08	7.6629	32.0614

ตารางที่ ข.5 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	7.6991	32.2130
947.15	7.7346	32.3615
971.19	7.7693	32.5066
995.22	7.8031	32.6481
1019.26	7.8361	32.7860
1043.30	7.8681	32.9202
1067.33	7.8993	33.0507
1091.37	7.9296	33.1775
1115.41	7.9590	33.3005
1139.45	7.9875	33.4198
1163.48	8.0152	33.5355
1187.52	8.0420	33.6476
1211.56	8.0679	33.7561
1235.59	8.0930	33.8612
1259.63	8.1173	33.9630
1283.67	8.1409	34.0614
1307.70	8.1636	34.1567
1331.74	8.1857	34.2489
1355.78	8.2070	34.3380
1379.82	8.2276	34.4242
1403.85	8.2475	34.5076
1427.89	8.2668	34.5883
1451.93	8.2855	34.6664
1475.96	8.3035	34.7419
1500.00	8.3210	34.8149



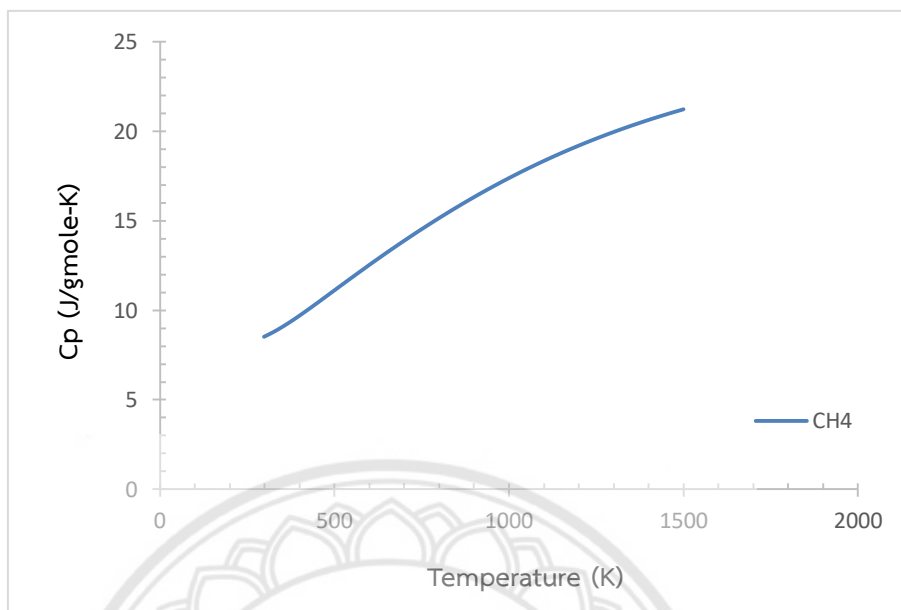
รูปที่ ข.5 ความจุความร้อนจำเพาะของไนโตรเจนในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

ตารางที่ ข.6 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของมีเทนที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	8.5217	8.5217
322.19	8.7550	8.7550
346.22	9.0216	9.0216
370.26	9.3149	9.3149
394.30	9.6283	9.6283
418.34	9.9560	9.9560
442.37	10.2932	10.2932
466.41	10.6358	10.6358
490.45	10.9811	10.9811
514.48	11.3267	11.3267
538.52	11.6711	11.6711
562.56	12.0131	12.0131
586.59	12.3518	12.3518
610.63	12.6868	12.6868
634.67	13.0176	13.0176
658.71	13.3438	13.3438
682.74	13.6653	13.6653
706.78	13.9817	13.9817
730.82	14.2931	14.2931
754.85	14.5991	14.5991
778.89	14.8997	14.8997
802.93	15.1948	15.1948
826.96	15.4841	15.4841
851.00	15.7676	15.7676
875.04	16.0452	16.0452
899.08	16.3168	16.3168

ตารางที่ ข.6 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	16.5824	16.5824
947.15	16.8419	16.8419
971.19	17.0952	17.0952
995.22	17.3425	17.3425
1019.26	17.5836	17.5836
1043.30	17.8187	17.8187
1067.33	18.0476	18.0476
1091.37	18.2706	18.2706
1115.41	18.4876	18.4876
1139.45	18.6988	18.6988
1163.48	18.9042	18.9042
1187.52	19.1039	19.1039
1211.56	19.2980	19.2980
1235.59	19.4866	19.4866
1259.63	19.6699	19.6699
1283.67	19.8479	19.8479
1307.70	20.0208	20.0208
1331.74	20.1886	20.1886
1355.78	20.3516	20.3516
1379.82	20.5099	20.5099
1403.85	20.6635	20.6635
1427.89	20.8126	20.8126
1451.93	20.9574	20.9574
1475.96	21.0979	21.0979
1500.00	21.2343	21.2343



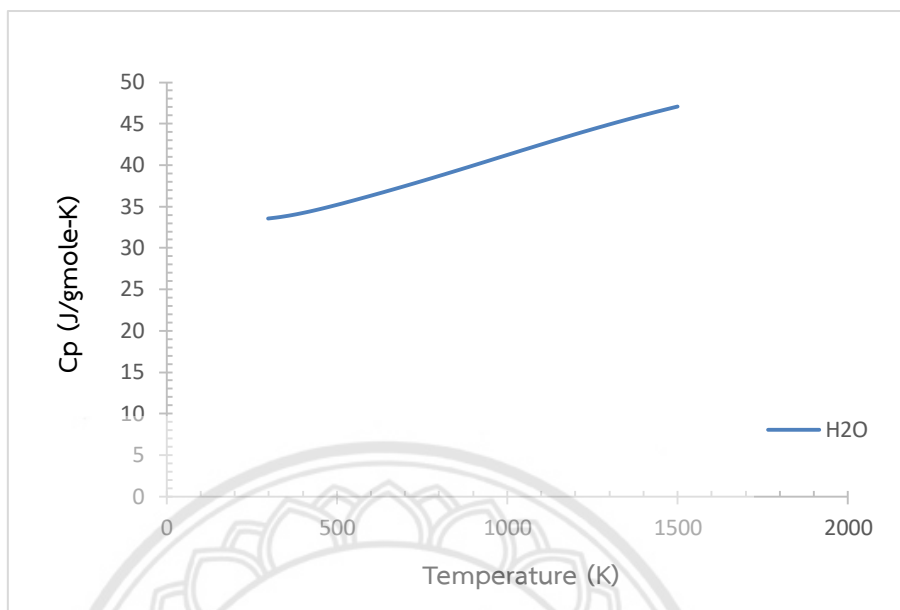
รูปที่ ข.6 ความจุความร้อนจำเพาะของมีเทนในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

ตารางที่ ข.7 ความจุความร้อนจำเพาะ (C_p) ของน้ำที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
298.15	8.0200	33.5556
322.19	8.0476	33.6711
346.22	8.0819	33.8146
370.26	8.1224	33.9839
394.30	8.1683	34.1760
418.34	8.2187	34.3872
442.37	8.2730	34.6140
466.41	8.3301	34.8533
490.45	8.3897	35.1023
514.48	8.4510	35.3588
538.52	8.5137	35.6211
562.56	8.5775	35.8881
586.59	8.6422	36.1589
610.63	8.7077	36.4330
634.67	8.7739	36.7102
658.71	8.8409	36.9903
682.74	8.9085	37.2733
706.78	8.9768	37.5591
730.82	9.0458	37.8478
754.85	9.1155	38.1393
778.89	9.1858	38.4335
802.93	9.2568	38.7303
826.96	9.3283	39.0295
851.00	9.4003	39.3308
875.04	9.4727	39.6339
899.08	9.5456	39.9387

ตารางที่ ข.7 (ต่อ)

อุณหภูมิ (K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (cal/gmol-K)	ความจุความร้อนจำเพาะ (J/gmole-K)
923.11	9.6187	40.2446
947.15	9.6920	40.5514
971.19	9.7654	40.8586
995.22	9.8389	41.1658
1019.26	9.9122	41.4727
1043.30	9.9854	41.7789
1067.33	10.0583	42.0840
1091.37	10.1309	42.3876
1115.41	10.2030	42.6894
1139.45	10.2746	42.9891
1163.48	10.3457	43.2863
1187.52	10.4161	43.5808
1211.56	10.4857	43.8723
1235.59	10.5546	44.1605
1259.63	10.6227	44.4453
1283.67	10.6899	44.7265
1307.70	10.7562	45.0039
1331.74	10.8216	45.2774
1355.78	10.8859	45.5467
1379.82	10.9493	45.8119
1403.85	11.0117	46.0728
1427.89	11.0730	46.3294
1451.93	11.1333	46.5816
1475.96	11.1925	46.8293
1500.00	11.2506	47.0726



รูปที่ ข.7 ความจุความร้อนจำเพาะของน้ำในช่วงอุณหภูมิ 289.15 – 1500 K

ตารางที่ ข.8 เอนทัลปีมาตรฐานของการเกิด (Standard enthalpy of formation, (ΔH_0^f))

เอนทัลปีมาตรฐาน ของการเกิด (ΔH_0^f)	(J/kgmol)	(J/gmol)
NH3	-45,898,000	-45,898
H2	0	0
CO	-110,530,000	-110,530
CO2	-393,510,000	-393,510
N2	0	0
CH4	-74,520,000	-74,520
H2O	-241,814,000	-241,814

ที่มา : Perry's chemical engineers' handbook



ภาคผนวก ค

ขั้นตอนในการเขียนโปรแกรมโดยแม่โครโปรแกรม
ในไมโครซอฟท์เอกซ์เซล

(1) กำหนดอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้าของสารแต่ละตัว จากนั้นคำนวณหาอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้าของสารแต่ละตัว โดยพิจารณาจากปฏิกิริยาการสลายตัวของแอมโมเนีย :



Inlet Molar Flow Rate (gmole/sec)				
NH3	10	gmole/sec	0	gmole/sec
H2	2	gmole/sec	17	gmole/sec
CO	3	gmole/sec	3	gmole/sec
CO2	3	gmole/sec	3	gmole/sec
N2	2	gmole/sec	7	gmole/sec
CH4	6	gmole/sec	6	gmole/sec
H2O	33	gmole/sec	33	gmole/sec
Total	59	gmole/sec	69	gmole/sec

รูปที่ ค.1 อัตราการไหลเชิงโมลของสารขาเข้า

(2) คำนวณจำนวนโมลของสารแต่ละตัวในถังปฏิกรณ์โดยพิจารณาระบบเป็นแก๊สในอุดมคติ รวมถึงความดันในถังปฏิกรณ์

PV = NRT \implies N = PV/(RT)				
Number of gmole in the CSTR reactor (gmole) at the initial time				
	N = PV/(RT)		P = NRT/V	
NH3	703	gmole =	59,322	Pa
H2	141	gmole =	11,864	Pa
CO	211	gmole =	17,797	Pa
CO2	211	gmole =	17,797	Pa
N2	141	gmole =	11,864	Pa
CH4	422	gmole =	35,593	Pa
H2O	2318	gmole =	195,763	Pa
Total	4145	gmole =	350,000	Pa

รูปที่ ค.2 จำนวนโมลและความดันในถังปฏิกรณ์

(3) จากรูปที่ ค.3 คือข้อมูลจากโปรแกรม Aspen Plus ซึ่งเป็นข้อมูลที่ใช้คำนวณ ค่าผลรวมของการเปลี่ยนแปลงเอนทัลปีมาตรฐานของการเกิดของสารนั้นๆ เมื่อเวลาผ่านไป รวมถึงคำนวณ ค่าความจุความร้อนของสารนั้นๆเมื่อเวลาผ่านไปเช่นกัน

CH ₄ ,gas								
T (K)	P (bar)	C _p (cal/gmol/K)	ΔH (cal/gmole)	ΣH (cal/gmole)	ΣH _{Lower} (I/gmole)	ΣH _{Upper} (I/gmole)	C _{p,Upper} (I/gmole/K)	T _{Upper} (K)
298.15	1.01325	8.521731	0	0	0	868.7660404	36.63080703	322.187
322.187	1.01325	8.754973	207.640067	207.640067	868.7660404	1762.668296	37.74638277	346.224
346.224	1.01325	9.021602	213.6477666	421.2878337	1762.668296	2684.726254	38.97350394	370.261
370.261	1.01325	9.314891	220.3771411	641.6649748	2684.726254	3637.292267	40.2848072	394.298
394.298	1.01325	9.6283	227.668741	869.3337158	3637.292267	4622.097107	41.65593747	418.335
418.335	1.01325	9.956008	235.3740057	1104.707722	4622.097107	5640.334198	43.0665396	442.372
442.372	1.01325	10.29315	243.3645054	1348.072227	5640.334198	6692.756915	44.50035456	466.409
466.409	1.01325	10.63584	251.5350663	1599.607293	6692.756915	7779.773979	45.94496424	490.446
490.446	1.01325	10.98111	259.8033136	1859.410607	7779.773979	8901.533229	47.39108016	514.483
514.483	1.01325	11.32674	268.1068952	2127.517502	8901.533229	10057.98941	48.83192424	538.52
538.52	1.01325	11.67111	276.3996602	2403.917162	10057.98941	11248.95897	50.26276856	562.557
562.557	1.01325	12.01309	284.6485577	2688.56572	11248.95897	12474.15932	51.68009056	586.594
586.594	1.01325	12.35184	292.8299112	2981.395631	12474.15932	13733.23745	53.0815712	610.631

รูปที่ ค.3 เอนทัลปีมาตรฐานของการเกิด และค่าความจุความร้อน ของมีเทนที่ความดัน 1 บาร์

อุณหภูมิ 298.15-1500 K

(4) คำนวณจำนวนโมลในถังของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาเปลี่ยนแปลงไป 0.001 วินาที

Ni (gmole)						
N _{NH3} (gmole)	N _{H2} (gmole)	N _{CO} (gmole)	N _{CO2} (gmole)	N _{N2} (gmole)	N _{CH4} (gmole)	N _{H2O} (gmole)
0	1,194.28	210.76	210.76	491.76	421.51	2318.31
0	1,194.28	210.76	210.76	491.76	421.51	2,318.31

รูปที่ ค.4 จำนวนโมลในถังของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาผ่านไป

(5) คำนวณความดันในถังของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาเปลี่ยนแปลงไป 0.001 วินาที

P _i (Pa)						
P _{NH3} (Pa)	P _{H2} (Pa)	P _{CO} (Pa)	P _{CO2} (Pa)	P _{N2} (Pa)	P _{CH4} (Pa)	P _{H2O} (Pa)
0	100847.46	17796.61	17796.61	41525.42	35593.22	195762.71
0	100,847.46	17,796.61	17,796.61	41,525.42	35,593.22	195,762.71

รูปที่ ค.5 ความดันในถังของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาผ่านไป

(6) คำนวณอัตราการไหลเชิงโมลขาออกของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาเปลี่ยนแปลงไป 0.001 วินาที

Fi (gmole/s)						
F _{NH3} (gmole/s)	F _{H2} (gmole/s)	F _{CO} (gmole/s)	F _{CO2} (gmole/s)	F _{N2} (gmole/s)	F _{CH4} (gmole/s)	F _{H2O} (gmole/s)
0	17	3	3	7	6	33
0	17	3	3	7	6	33

รูปที่ ค.6 อัตราการไหลเชิงโมลขาออกของสารแต่ละตัวเมื่อเวลาผ่านไป

(7) คำนวณค่า Rate coefficient โดยค่านี้จะขึ้นอยู่กับอุณหภูมิขาออก ณ เวลานั้นๆ ซึ่งค่า Rate coefficient จะใช้ในการคำนวณค่า Rate expression

ki		
k ₂ [gmol*Pa ^{0.5} /kgcat/s]	k ₃ [gmol*Pa ⁻¹ /kgcat/s]	k ₄ [gmol*Pa ^{0.5} /kgcat/s]
114,124.23	3.09E-03	17,237.99
5.97E+01	3.73E-04	8.00

รูปที่ ค.7 ค่า Rate coefficient

(8) คำนวณค่า Equilibrium constants โดยค่านี้จะขึ้นอยู่กับอุณหภูมิขาออก ณ เวลานั้นๆ ซึ่งค่า Equilibrium constants จะใช้ในการคำนวณค่า Rate expression

Ki		
K ₂ (Pa ²)	K ₃ (-)	K ₄ (Pa ²)
137,134,579,288.54	1.6	215,031,232,936.89
122,616,071.79	4.96	607,937,119.12

รูปที่ ค.8 Equilibrium constants

(9) คำนวณค่า Adsorption equilibrium constants โดยค่าที่คำนวณได้นั้นจะนำไปใช้ในการคำนวณค่า DEN ซึ่งค่า DEN ที่คำนวณได้จะนำไปคำนวณค่า Rate expression ต่อไป

Ki (Pa ⁻¹)			
K _{H₂} (Pa ⁻¹)	K _{CO} (Pa ⁻¹)	K _{CH₄} (Pa ⁻¹)	K _{H₂O} (Pa ⁻¹)
1.69E-09	5.02E-06	7.48E-07	3.14E-03
2.30E-08	4.64E-05	2.49E-06	1.93E-04

รูปที่ ค.9 Adsorption equilibrium constants

(10) คำนวณค่า rate expressions ซึ่งค่าที่คำนวณได้จะนำไปคำนวณอุณหภูมิขาออก

DEN	r _i (gmole/s)		
	-r ₂ (gmol CO/s)	-r ₃ (gmol H ₂ /s)	-r ₄ (gmol CO ₂ /s)
1.12E+00	-3.84E+06	-1.14E+06	-1.14E+06
1.92E+00	1.43E+04	-6.29E+04	2.23E+02

รูปที่ ค.10 rate expressions

(11) คำนวณผลรวมของการเปลี่ยนแปลงเอนทัลปีมาตรฐานของการเกิดของสารนั้นๆ และค่าความจุความร้อน เมื่อเวลาผ่านไป ซึ่งค่าความจุความร้อนที่คำนวณได้จะนำไปคำนวณอุณหภูมิขาออก ส่วนผลรวมของการเปลี่ยนแปลงเอนทัลปีมาตรฐานของการเกิดจะนำไปคำนวณค่าเอนทัลปีของปฏิกิริยา

CH ₄ , gas							
T _{Lower} (K)	C _{p,Lower} (J/gmole/K)	ΣH _{Lower} (J/gmole)	T _{Upper} (K)	C _{p,Upper} (J/gmole/K)	ΣH _{Upper} (J/gmole)	C _{p,CH₄} (J/gmole/K)	H _{CH₄} (J/gmole)
971.186	71.53	36,354.01	995.22	72.56	38,085.72	71.69	36,628.78
754.853	61.08	21,974.45	778.89	62.34	23,457.81	62.23	23,330.95

รูปที่ ค.11 ค่าต่างๆที่ใช้ในการคำนวณหาค่าเอนทัลปีของปฏิกิริยา (Heat of reaction)

(12) คำนวณค่าเอนทัลปีของแต่ละปฏิกิริยา

ΔH_{rxn1}	ΔH_{rxn2}	ΔH_{rxn3}	ΔH_{rxn4}
(J/gmole of NH ₃)	(J/gmole of CO)	(J/gmole of H ₂)	(J/gmole of CO ₂)
55,465.17	-225,986.10	34,681.19	-191,304.91
53,691.82	-222,412.74	36,881.76	-185,530.98

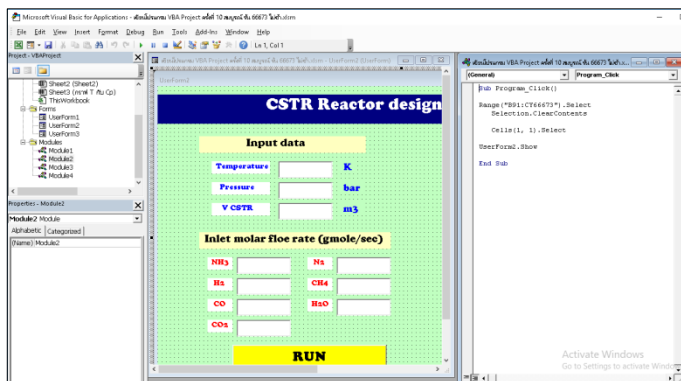
รูปที่ ค.12 ค่าเอนทัลปีของแต่ละปฏิกิริยา

(13) คำนวณการแปลงผัน (Conversion) ของสารแต่ละตัวรวมถึงอุณหภูมิขาออกเมื่อเวลาเปลี่ยนแปลงไป 0.001 วินาที

Time (Seconds)	XH ₂	XCO	XCO ₂	XCH ₄	XH ₂ O	T (oK)
0	0	0	0	0	0	975.00
0.001	0	0	0	0	0	776.8343

รูปที่ ค.13 ค่าการแปลงผัน (Conversion) ของสารแต่ละตัวและอุณหภูมิขาออกเมื่อเวลาผ่านไป

(14) จากนั้นทำการบันทึกแมโคร (Record macro) และสร้าง UserForm โดยเชื่อมโยงข้อมูลจากเอกซ์เซลที่ได้กำหนดค่าเอาไว้ ซึ่งในหน้าต่าง UserForm จะสร้างปุ่มใช้งานต่างๆ ขึ้นมาไม่ว่าจะเป็น Command Button, Text box, Frame เป็นต้น และเขียนโค้ดในหน้าต่าง Module ที่สร้างไว้ เมื่อสร้าง UserForm และบันทึกแมโคร เสร็จสิ้นแล้วจะแสดงโค้ดออกมาเป็นภาษาของ VBA ซึ่งสามารถเรียกใช้งานได้เมื่อกดที่ปุ่มรัน โดยไม่ต้องกดยี่ห้อของเอกซ์เซลทีละขั้นตอน



รูปที่ ค.14 การสร้าง User Form และบันทึกโค้ดโดยแมโครโปรแกรม



ภาคผนวก ง

ขั้นตอนการหาสภาวะที่เหมาะสม

โดยใช้โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

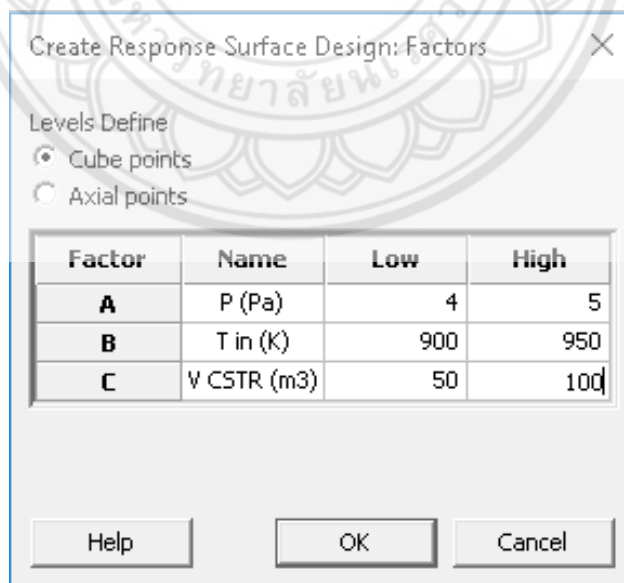
มหาวิทยาลัยบูรพา

ง. ขั้นตอนการหาสถานะที่เหมาะสมโดยใช้โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

(1) สถานะและอัตราการไหลเชิงโมลขาเข้า

อุณหภูมิ	900 เคลวิน ถึง 950 เคลวิน
ความดัน	4 บาร์ ถึง 5 บาร์
ปริมาตรถังปฏิกรณ์	50 ถึง 100 ลูกบาศก์เมตร
แอมโมเนีย	10 กรัมโมลต่อนาที
คาร์บอนมอนอกไซด์	3 กรัมโมลต่อนาที
คาร์บอนไดออกไซด์ไซด์ไซด์	3 กรัมโมลต่อนาที
ไฮโดรเจน	2 กรัมโมลต่อนาที
ไนโตรเจน	2 กรัมโมลต่อนาที
มีเทน	6 กรัมโมลต่อนาที
น้ำ	33 กรัมโมลต่อนาที

(1) กำหนดช่วงของข้อมูลที่ใช้ในการศึกษาในโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)



รูปที่ ง.1 ข้อมูลที่ใช้ในการศึกษา

(2) โปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) จะแสดงเงื่อนไขของข้อมูล 20 ชุด เพื่อนำไปทดสอบในแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลที่คณะผู้จัดทำได้ออกแบบไว้

StdOrder	RunOrder	PtType	Blocks	P (bar)	T _{in} (K)	V (m ³)
1	1	1	1	4	900	50
2	2	1	1	5	900	50
3	3	1	1	4	950	50
4	4	1	1	5	950	50
5	5	1	1	4	900	100
6	6	1	1	5	900	100
7	7	1	1	4	950	100
8	8	1	1	5	950	100
9	9	-1	1	3.5	925	75
10	10	-1	1	5.5	925	75
11	11	-1	1	4.5	875	75
12	12	-1	1	4.5	975	75
13	13	-1	1	4.5	925	25
14	14	-1	1	4.5	925	125
15	15	0	1	4.5	925	75
16	16	0	1	4.5	925	75
17	17	0	1	4.5	925	75
18	18	0	1	4.5	925	75
19	19	0	1	4.5	925	75
20	20	0	1	4.5	925	75

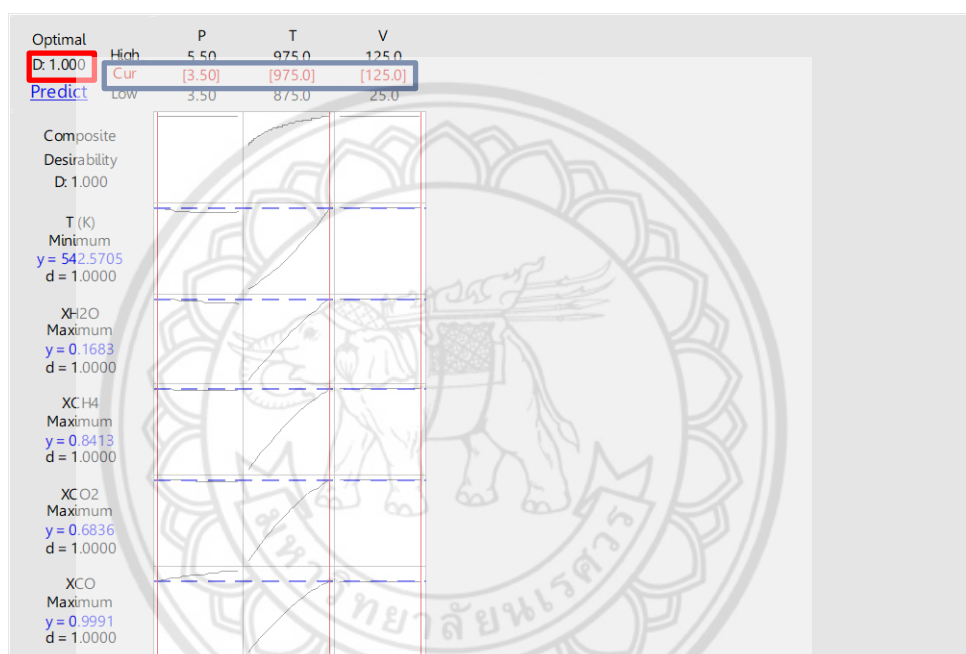
รูปที่ ง.2 เงื่อนไขของข้อมูล จากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

(4) นำข้อมูลจากโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) 20 ชุด ไปใช้กับแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟท์เอกซ์เซลที่ออกแบบไว้ จะได้การแปลงผัน (Conversion) ของสารแต่ละตัวและอุณหภูมิขาออก แสดงดังรูปที่ ง.3

↓	C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10	C11	C12	C13
	StdOrder	RunOrder	PtType	Blocks	P (bar)	T _{in} (K)	V CSTR (m ³)	XH ₂	XCO	XCO ₂	XCH ₄	XH ₂ O	T (K)
1	1	1	1	1	4.0	900	50	0.140700	0.99940	0.85580	0.9276	0.186300	550.480
2	2	2	1	1	5.0	900	50	0.124200	0.99930	0.78210	0.8907	0.172800	543.878
3	3	3	1	1	4.0	950	50	0.163100	0.99960	0.95120	0.9754	0.203200	568.930
4	4	4	1	1	5.0	950	50	0.153300	0.99960	0.93230	0.9660	0.197300	559.209
5	5	5	1	1	4.0	900	100	0.140700	0.99950	0.85580	0.9276	0.186300	550.480
6	6	6	1	1	5.0	900	100	0.100800	0.99900	0.60300	0.8010	0.166100	536.250
7	7	7	1	1	4.0	950	100	0.147700	0.99950	0.87770	0.9386	0.210200	550.510
8	8	8	1	1	5.0	950	100	0.135200	0.99940	0.83330	0.9163	0.200600	544.922
9	9	9	-1	1	3.5	925	75	0.142900	0.99930	0.84240	0.9209	0.205200	548.194
10	10	10	-1	1	5.5	925	75	0.112500	0.99920	0.70660	0.8529	0.179800	538.790
11	11	11	-1	1	4.5	875	75	0.001777	0.75239	0.10797	0.3222	0.004818	567.145
12	12	12	-1	1	4.5	975	75	0.007747	0.99930	0.53960	0.6950	0.149700	548.230
13	13	13	-1	1	4.5	925	25	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
14	14	14	-1	1	4.5	925	125	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
15	15	15	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
16	16	16	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
17	17	17	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
18	18	18	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
19	19	19	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145
20	20	20	0	1	4.5	925	75	0.004823	0.99910	0.24130	0.6202	0.102100	549.145

รูปที่ ๓.3 ผลลัพธ์ของข้อมูลจากแมโครโปรแกรมในไมโครซอฟต์แวร์เอกซ์เซลตามเงื่อนไขของโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18)

(5) จากนั้นโปรแกรมมินิแท็บ (Minitab 18) จะแสดงสถานะที่เหมาะสม โดยใช้ฟังก์ชัน Response Optimization ซึ่งอุณหภูมิ ความดัน และปริมาตร ที่เหมาะสมสำหรับการสลายตัวของแอมโมเนีย แสดงดัง รูปที่ ค.4

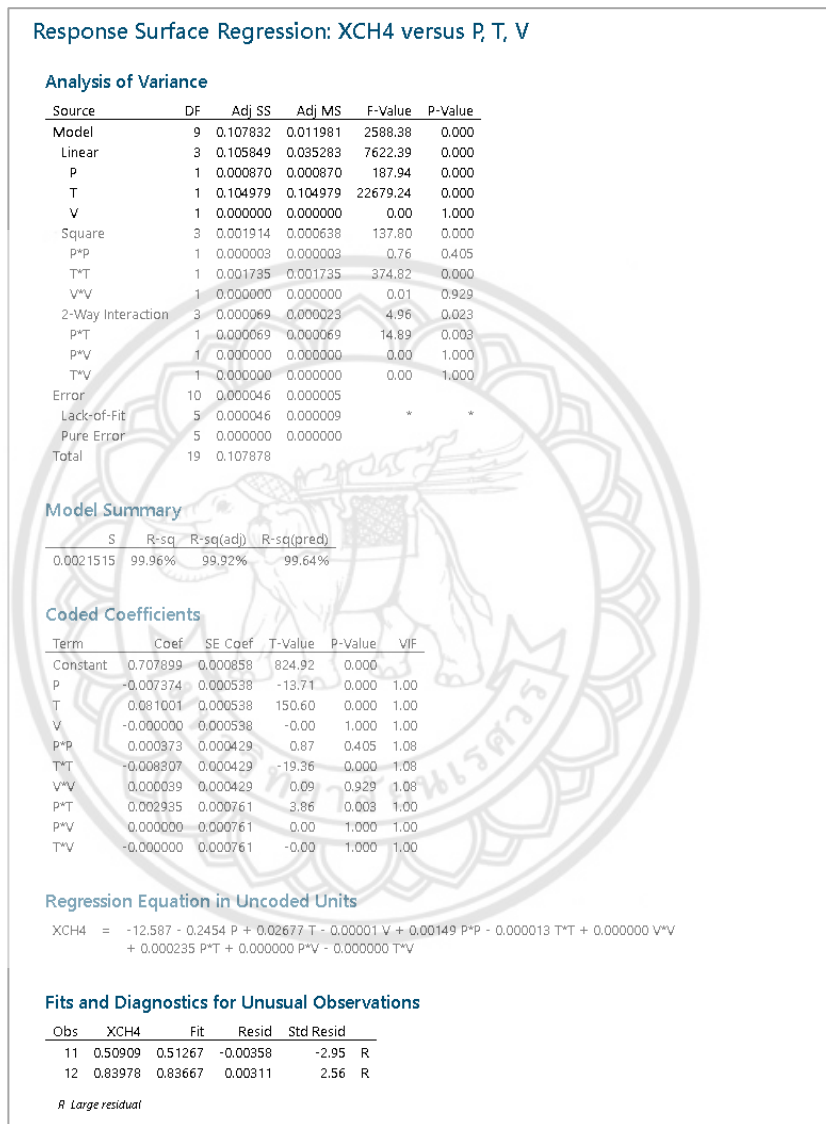


รูปที่ ๓.4 สถานะที่เหมาะสม โดยใช้ฟังก์ชัน Response Optimization

(6) พิจารณา ค่า P-value เพื่อตรวจสอบว่าปัจจัยใดมีนัยสำคัญต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน โดยถ้า ค่า P-value มีค่าน้อยกว่า 0.05 หมายถึง ปัจจัยนั้นมีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน กรณีที่ ค่า P-value มากกว่า 0.05 หมายถึง ปัจจัยนั้นไม่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน [28] แสดงดังรูปที่ ๓.5

(7) สำหรับ ค่า R-Squared หมายถึง สถิติที่ใช้วัดว่าตัวแบบคณิตศาสตร์ที่ได้นี้มีความสมรูปกับข้อมูลมากน้อยอย่างไร หรือรู้จักกันในอีกความหมายหนึ่งว่าเป็น ค่าสัมประสิทธิ์แสดงการตัดสินใจ

(Coefficient of Determination) หรือ ค่าสัมประสิทธิ์แสดงการตัดสินใจเชิงซ้อน (Coefficient of Multiple Determination) สำหรับการวิเคราะห์สมการถดถอยแบบพหุคูณ (Multiple Regression) ซึ่งถ้า ค่า R-Squared สูงถึง ร้อยละ 98.5 ถือว่าเป็นผลที่ดีมาก [28] แสดงดังรูปที่ ง.5



รูปที่ ง.5 ค่า P-Value และ ค่า R-Squared ที่มีผลต่อการแปลงผัน (Conversion) ของมีเทน