

## แบบจำลองปฏิกิริยาดรายรีฟอร์มมิงของก๊าซชีวภาพด้วยตัวเร่งปฏิกิริยาแพลทินัม Kinetic Modeling for Dry Reforming of Biogas on a Platinum-Based Catalyst

ประวี แดงสกุล<sup>1</sup> และ บุญลือ สวัสดิ์มงคล<sup>1\*</sup>

ศูนย์วิจัยเทคโนโลยีการเผาไหม้และพลังงานทางเลือก (CTAE) วิทยาลัยเทคโนโลยีอุตสาหกรรม  
มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ 1518 ถนนประชากรราษฎร์ 1 เขตบางซื่อ กรุงเทพฯ 10800

\*ติดต่อ: boonlues@kmutnb.ac.th

### บทคัดย่อ

กระบวนการรีฟอร์มมิงเป็นกระบวนการหลักที่ใช้ในการผลิตก๊าซไฮโดรเจน โดยไฮโดรเจนสามารถนำไปใช้ประโยชน์ได้หลากหลายรูปแบบ เช่น ใช้ในการผลิตกระแสไฟฟ้าด้วยเซลล์เชื้อเพลิง (Fuel Cell) ใช้กับเครื่องยนต์สันดาปภายใน หรือใช้ในระบบบำบัดไอเสีย เป็นต้น งานวิจัยนี้สร้างขึ้นเพื่อศึกษากระบวนการผลิตไฮโดรเจนด้วยปฏิกิริยาดรายรีฟอร์มมิง (Dry Reforming) จากก๊าซชีวภาพบนตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดแพลทินัม (Platinum Catalyst) โดยการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์และแบบจำลองกระบวนการทางเคมีสำหรับใช้ร่วมกับการจำลองการไหลด้วยพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational Fluid Dynamics, CFD) เพื่อวิเคราะห์กระบวนการทั้งทางฟิสิกส์และทางเคมีที่เกิดขึ้นบนผิวตัวเร่งปฏิกิริยา โดยนำผลจากการทดลองมาใช้เปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการวิเคราะห์ด้วย CFD ผลจากแบบจำลองพบว่า การวิเคราะห์ด้วย CFD แสดงให้เห็นถึงบริเวณที่เกิดขึ้นของปฏิกิริยาเคมีบนตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งข้อมูลที่ได้นี้สามารถนำไปใช้เพื่อพัฒนาการผลิตไฮโดรเจนจากก๊าซชีวภาพให้มีประสิทธิภาพสูงขึ้นต่อไป

**คำหลัก:** CFD, Dry Reforming, Platinum Catalyst, กระบวนการผลิตไฮโดรเจน, ก๊าซชีวภาพ, แบบจำลองทางคณิตศาสตร์

### Abstract

Reforming processes are primarily used to produce hydrogen which is then utilised in different areas, such as fuel cell, internal combustion engines, and aftertreatment systems. In this study, the hydrogen production that is generated by dry reforming of biogas on platinum catalyst is focussed by mathematical, physical, and chemical modelling. A computational fluid dynamics (CFD) is employed to get knowledge about the dry reforming of biogas. The simulation results are validated with published experimental data. The CFD can provide the information about the catalyst zone which the chemical reaction is occurred. Therefore, it can be used to improve the efficiency of hydrogen production from biogas.

**Keywords:** Biogas, CFD, Dry Reforming, Platinum Catalyst

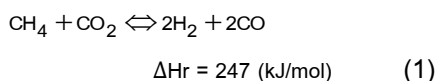
## AEC-104

### 1. บทนำ

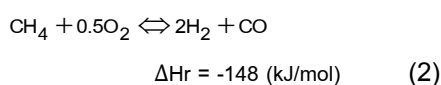
เนื่องจากแหล่งพลังงานที่ใช้ในปัจจุบันเริ่มลดน้อยลง ทางหน่วยงานภาครัฐได้หันมาให้ความสนใจในเรื่องดังกล่าวมากขึ้น ทั้งในแง่การค้นคว้าวิจัยหาเชื้อเพลิงชนิดใหม่มาทดแทน ก๊าซไฮโดรเจน (H<sub>2</sub>) เป็นเชื้อเพลิงชนิดหนึ่งที่ได้รับ ความสนใจอย่างมากในปัจจุบัน ก๊าซไฮโดรเจนสามารถนำไปใช้ได้หลายหลายรูปแบบ เช่น การผลิตไฟฟ้าจากเซลล์เชื้อเพลิงหรือแม้กระทั่งการนำก๊าซไฮโดรเจนไปใช้ในระบบบำบัดไอเสียในรถยนต์ [1] ก๊าซไฮโดรเจนสามารถผลิตได้จากหลายวัตถุดิบตามธรรมชาติ โดยหนึ่งในวัตถุดิบที่เป็นทางเลือกที่น่าสนใจคือก๊าซชีวภาพ (Biogas) ที่สามารถผลิตได้ภายในประเทศ โดยทั่วไป ก๊าซชีวภาพประกอบด้วย ก๊าซมีเทน (CH<sub>4</sub>) ประมาณ 50 – 60 เปอร์เซ็นต์ ก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>) 25 – 35 เปอร์เซ็นต์ [2]

ปัจจุบันได้มีนักวิจัยศึกษากระบวนการผลิตก๊าซไฮโดรเจนจากวิธีต่าง ๆ โดยกระบวนการรีฟอร์มมิ่งเพื่อผลิตก๊าซไฮโดรเจนนั้นประกอบด้วย 4 วิธีการหลัก ได้แก่ (1) Dry Reforming (2) Partial Oxidation Reforming (3) Steam Reforming และ (4) Water-gas Shift โดยวิธีที่เหมาะสมนั้นขึ้นอยู่กับนักวิจัยที่จะเลือกใช้ตามความเหมาะสมของแต่ละวัตถุดิบ [3] นอกจากนี้ ได้มีการศึกษาถึงวัสดุที่ใช้เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา อัตราส่วนผสมของสารตั้งต้น หรือแม้กระทั่งอุณหภูมิที่เกิดขึ้นบนตัวเร่งปฏิกิริยา [4] ซึ่งสิ่งเหล่านี้ล้วนมีผลต่อประสิทธิภาพในการผลิตก๊าซไฮโดรเจนทั้งสิ้น

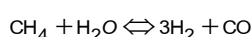
#### Dry Reforming



#### Partial Oxidation Reforming

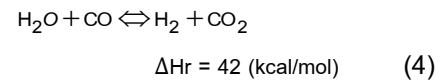


#### Steam Reforming



$$\Delta H_r = 206 \text{ (kJ/mol)} \quad (3)$$

#### Water-gas Shift

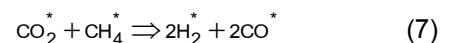


พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (Computational Fluid Dynamics, CFD) เข้ามามีบทบาทเพิ่มขึ้นเนื่องจากเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ถูกพัฒนาไปอย่างรวดเร็ว การใช้ CFD ศึกษาปฏิกิริยาทางเคมีที่เกิดขึ้นบนตัวเร่งปฏิกิริยา [5, 6] จึงช่วยลดเวลาในการพัฒนา และลดต้นทุนได้มากเช่นกัน อย่างไรก็ตามแบบจำลองปฏิกิริยาทางเคมีที่แม่นยำจำเป็นต้องใช้กระบวนการที่เหมาะสมและครอบคลุมเพื่อหาองค์ประกอบที่ทำให้เกิดความแม่นยำสูงสุด

ในงานวิจัยนี้เน้นการศึกษากระบวนการดรายรีฟอร์มมิ่ง (Dry Reforming) ของก๊าซชีวภาพบนตัวเร่งปฏิกิริยาชนิดแพลทินัม (Pt) โดยใช้แบบจำลองทางเคมีร่วมกับพลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ เพื่อวิเคราะห์ปฏิกิริยาเคมีที่เกิดขึ้นบนตัวเร่งปฏิกิริยา โดยนำผลจากการทดลองมาใช้เพื่อเปรียบเทียบกับผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณ

### 2. ทฤษฎีที่ใช้ในงานวิจัย

เนื่องจากงานวิจัยนี้ศึกษาการเกิดปฏิกิริยาบนผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา (Surface Reaction) ดังนั้นแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมีของ Langmuir Hinshelwood [7] จึงถูกนำมาใช้เพื่อหาอัตราการเกิดปฏิกิริยาเคมี (Reaction Rate) ของสารตั้งต้นที่ถูกดูดซับอยู่บนพื้นผิวตัวเร่งปฏิกิริยา โดยกำหนดให้ปฏิกิริยาที่เกิดช้าที่สุด (Rate Determining Step) เป็นปฏิกิริยาที่ใช้ในการหาอัตราการเกิดของปฏิกิริยา ดังนั้นปฏิกิริยาดรายรีฟอร์มมิ่งในงานวิจัยนี้ตั้งสมการที่ (1) สามารถเขียนเป็นปฏิกิริยาย่อยที่เกิดขึ้นบนผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาได้ตั้งสมการที่ (5) – (9)



## AEC-104



เมื่อ \* คือ ผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา

กำหนดให้สมการที่ (7) เป็นปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นที่สุดสามารถเขียนสมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาได้ดังสมการที่ (10)

$$-r_A = k_s \theta_{H_2} \theta_{CO} - k_{-s} \theta_{CH_4} \theta_{CO_2} \quad (10)$$

เมื่อ  $\theta$  คือ สัดส่วนพื้นผิวที่ก๊าซเกาะอยู่ จากทฤษฎีการดูดซับของ Langmuir Hinshelwood ค่า  $\theta$  สามารถคำนวณได้จากสมการที่ (11) – (14)

$$\theta_{CH_4} = \frac{K_{CH_4} C_{CH_4}}{(1 + K_{CH_4} C_{CH_4} + K_{CO_2} C_{CO_2} + K_{H_2} C_{H_2} + K_{CO} C_{CO})} \quad (11)$$

$$\theta_{CO_2} = \frac{K_{CO_2} C_{CO_2}}{(1 + K_{CH_4} C_{CH_4} + K_{CO_2} C_{CO_2} + K_{H_2} C_{H_2} + K_{CO} C_{CO})} \quad (12)$$

$$\theta_{CO} = \frac{K_{CO} C_{CO}}{(1 + K_{CH_4} C_{CH_4} + K_{CO_2} C_{CO_2} + K_{H_2} C_{H_2} + K_{CO} C_{CO})} \quad (13)$$

$$\theta_{H_2} = \frac{K_{H_2} C_{H_2}}{(1 + K_{CH_4} C_{CH_4} + K_{CO_2} C_{CO_2} + K_{H_2} C_{H_2} + K_{CO} C_{CO})} \quad (14)$$

เมื่อนำมาแทนค่าในสมการที่ (10) จะได้สมการอัตราการเกิดปฏิกิริยาได้ดังสมการที่ (15)

$$-r_A = \frac{k_s K_{CH_4} K_{CO_2} (C_{CH_4} C_{CO_2} - \frac{1}{K} C_{H_2} C_{CO})}{(1 + K_{CH_4} C_{CH_4} + K_{CO_2} C_{CO_2} + K_{H_2} C_{H_2} + K_{CO} C_{CO})^2} \quad (15)$$

เมื่อ  $\theta$  คือ สัดส่วนพื้นผิวของตัวเร่งปฏิกิริยา

$K_i$  คือ ค่าคงที่สมดุล (Equilibrium Constant)

ในการเกิดปฏิกิริยา

$K$  คือ ค่าคงที่สมดุล (Equilibrium Constant) ของปฏิกิริยารวม

$k_s$  คือ ค่าคงที่อัตรา (Rate Constant)

$C_i$  คือ ความเข้มข้น (Concentration) ของ

สารแต่ละชนิด

โดยสามารถหาค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยา ( $K_i$ ) [8] ได้จากสมการที่ (16)

$$K_i = \exp\left(\frac{\Delta S_i^0}{k_B}\right) \exp\left(\frac{\Delta H_i^0}{k_B T}\right) \quad (16)$$

เมื่อ  $\Delta S_i^0$  คือ Entropy of Adsorption (J/mol-K)

$\Delta H_i^0$  คือ Heat of Adsorption (J/mol)

$T$  คือ อุณหภูมิ (K)

$k_B$  คือ Boltzmann's constant (J/mol-K)

โดยค่า  $\Delta S_i^0$  ได้จากสมการที่ (17)

$$\Delta S_i^0 = R \left[ \ln \left[ \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{1/2}} \left( \frac{A}{N} \right) P^0 \right] \right] - \frac{1}{2} \quad (17)$$

เมื่อ  $\frac{A}{N}$  คือ อัตราส่วนของพื้นที่ต่อโมเลกุล

$h$  คือ Planck Constant (J-s)

$P^0$  คือ ความดันมาตรฐาน (1 atm)

ค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยา ( $K$ ) ได้จากสมการที่ (18)

$$K = \exp\left[\frac{\Delta H_{R,298}^0}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)\right] \exp\left[\frac{\Delta G_{R,298}^0}{RT_1}\right] \quad (18)$$

เมื่อ

$\Delta H_{R,298}^0$  คือ Standard Enthalpy ของปฏิกิริยา

รวมที่อุณหภูมิ 298 K (J/mol)

$\Delta G_{R,298}^0$  คือ Standard free energy ของปฏิกิริยา

รวมที่อุณหภูมิ 298 K (J/mol)

$T_1$  คือ อุณหภูมิอ้างอิง (298 K)

$T_2$  คือ อุณหภูมิของปฏิกิริยา (K)

$R$  คือ ค่าคงที่ของก๊าซ (Universal Gas

Constant) (8.314 J/mol-K)

และค่าคงที่อัตรา ( $k_s$ ) คำนวณได้จากสมการที่ (19)

$$k_s = \frac{A}{\sigma} \left( \frac{T}{T_0} \right)^\beta e^{-E_a/RT} \quad (19)$$

เมื่อ  $A$  คือ Pre-exponential Factor ( $\text{sec}^{-1}$ )

$\sigma$  คือ Site Density ( $\text{mol}/\text{cm}^2$ )

$T_0$  คือ อุณหภูมิอ้างอิง (298 K)

$T$  คือ อุณหภูมิของปฏิกิริยา (K)

## AEC-104

$\beta$  คือ Temperature Exponent

รูปที่ 1 ผลการทดลองการผลิตไฮโดรเจนจาก  
ปฏิกิริยา Dry Reforming ที่  $GHSV = 16,500 \text{ h}^{-1}$

### 3. วิธีการวิจัย

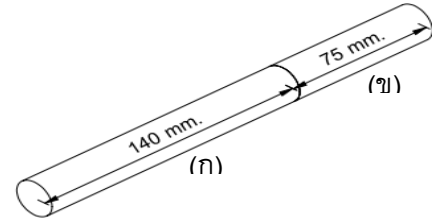
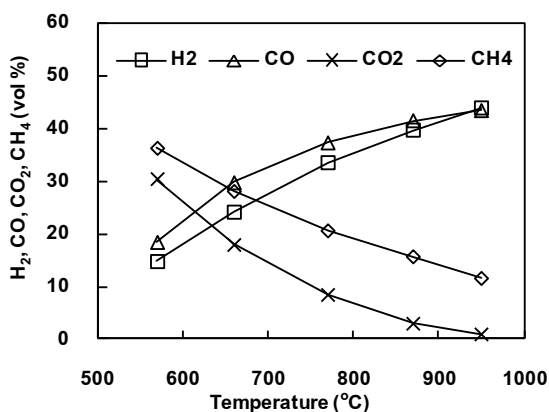
งานวิจัยนี้ใช้โปรแกรม Fluent ในการคำนวณ โดยการสร้างแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของตัวเร่งปฏิกิริยาดังนี้

#### 3.1 ข้อมูลจากการทดลอง

งานวิจัยนี้ถูกสร้างแบบจำลองตามผลการทดลอง การผลิตไฮโดรเจนจากก๊าซชีวภาพบนตัวปฏิกิริยา ทรายรีฟอร์มมิงของ [9] โดยมีข้อมูลดังตารางที่ 1 รูปที่ 1 และรูปที่ 2

ตารางที่ 1 ข้อมูลการทดลองของ [9]

ข้อมูล	ค่า
เส้นผ่านศูนย์กลางของตัวเร่งปฏิกิริยา (mm)	20
ความยาวตัวเร่งปฏิกิริยา (mm)	75
ความยาวส่วนทำความร้อน (mm)	140
รัศมีของเซลล์ตัวเร่งปฏิกิริยา (mm)	0.2663
เศษส่วนโมลของก๊าซมีเทนที่ทางเข้าตัวเร่งปฏิกิริยา	0.22
เศษส่วนโมลของก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ ที่ทางเข้าตัวเร่งปฏิกิริยา	0.14
Gas Hour Space Velocity (GHSV) ( $\text{h}^{-1}$ )	16,500
Site Density ( $\text{molecule}/\text{cm}^2$ )	$1.50 \times 10^{15}$



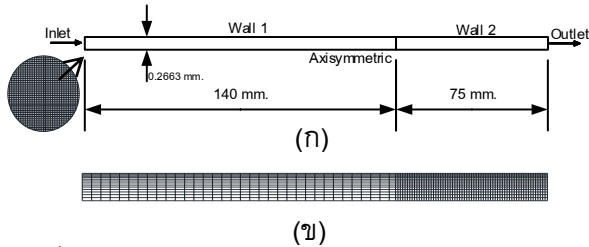
รูปที่ 2 ความยาวของตัวเร่งปฏิกิริยาโดยมี (ก) บริเวณที่ใช้เพิ่มอุณหภูมิ (Heat up Zone) และ (ข) ตัวเร่งปฏิกิริยาแบบ monolith

#### 3.2 แบบจำลองและกริด

งานวิจัยนี้ได้สร้างแบบจำลองการไหลแบบสองมิติ โดยพิจารณาเซลล์ของแคทตาลิสต์เพียงเซลล์เดียว และสร้างแบบจำลองเพียงครั้งหนึ่งตามแนวยาวของเซลล์ โดยมีขนาดรัศมี 0.2663 mm ความยาว 75 mm ในส่วนของตัวเร่งปฏิกิริยา (Wall 2) และความยาว 140 mm ในส่วนของบริเวณทำความร้อนของก๊าซก่อนผ่านตัวเร่งปฏิกิริยา (Wall 1) ดังรูปที่ 3 (ก) หลังจากนั้นทำการสร้างกริดแบบสี่เหลี่ยม โดยกำหนดความละเอียดของเส้นกริดตามแกนนอน (แกน x) ที่บริเวณผนังมากกว่าบริเวณกลางท่อ และกำหนดความละเอียดของเส้นกริดตามแกนตั้ง (แกน y) ให้ส่วนของตัวเร่งปฏิกิริยา มีความละเอียดมากกว่าส่วนของบริเวณทำความร้อนของก๊าซก่อนผ่านตัวเร่งปฏิกิริยา เนื่องจากในส่วนของบริเวณทำความร้อนของก๊าซก่อนผ่านตัวเร่งปฏิกิริยามีหน้าที่เพียงเพิ่มอุณหภูมิของก๊าซเท่านั้น ส่วนปฏิกิริยาเคมีจะเกิดบนตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งเป็นบริเวณที่ทำการศึกษาในงานวิจัยนี้ และได้ทำการทดสอบเพื่อหาจำนวนกริดที่เหมาะสมกับแบบจำลองนี้ โดยการสร้างกริดที่มีจำนวนกริดต่างกัน 5 ระดับในการทดลองเดียวกัน คือ ที่อุณหภูมิ 700°C โดยเปรียบเทียบกับค่าเศษส่วนโมล (Mole Fraction) ของไฮโดรเจน ผลการ

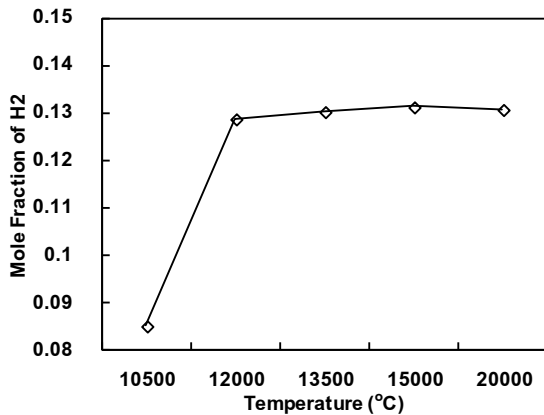
## AEC-104

วิเคราะห์พบว่าจำนวนกริดที่ 13,500 เป็นจำนวนที่เพียงพอสำหรับแบบจำลองนี้เนื่องจากผลลัพธ์ที่ได้มีค่าแตกต่างจากผลลัพธ์ที่ได้จาก 20,000 กริด เพียง 0.34 เปอร์เซ็นต์ ดังแสดงในรูปที่ 4



รูปที่ 3 (ก) แบบจำลองการไหลของตัวเร่งปฏิกิริยาในหนึ่งเซลล์

(ข) ลักษณะกริดภายในแบบจำลอง



รูปที่ 4 ค่าเศษส่วนโมล (Mole Fraction) ของไฮโดรเจนจากจำนวนกริดที่แตกต่างกันบนตัวเร่งปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 700 °C

### 3.3 เงื่อนไขขอบเขต และการทดลอง

หลังจากที่สร้างแบบจำลองการไหลร่วมกับการเกิดปฏิกิริยาเคมีและสร้างกริดตั้งที่กล่าวไว้ข้างต้นเป็นที่เรียบร้อยแล้ว ขั้นตอนต่อไปเป็นการกำหนดเงื่อนไขขอบเขต ในโปรแกรม Fluent กำหนดให้การไหลเป็นแบบราบเรียบ (Laminar Flow) โดยกำหนดความเร็วของก๊าซที่ทางเข้า (Velocity Inlet) และกำหนดค่าเศษส่วนโมลของก๊าซมีเทน และก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ ที่ทางเข้าดังแสดงในตารางที่ 1 และกำหนดให้อุณหภูมิของก๊าซที่ทางเข้าอยู่ที่ 25 °C หรือ 298.15 K สมการเคมีตามสมการที่ (1) ถูก

กำหนดที่ผนังของตัวเร่งปฏิกิริยา แต่เนื่องจากงานวิจัยนี้ใช้สมการอัตราปฏิกิริยาเคมีชนิด Langmuir Hinshelwood ซึ่งเป็นสมการที่นอกเหนือจากชุดค่าส่งมาตรฐานที่มีในโปรแกรม Fluent ดังนั้นจึงต้องใช้ชุดค่าส่งพิเศษที่ชื่อว่า User Define Function (UDF) ซึ่งคุณสมบัติเด่นของชุดค่าส่งนี้คือสามารถปรับแต่ง แก้ไข หรือเพิ่มเติมเข้าไปในโปรแกรมได้ ภาษาที่ใช้ในการเขียนคือ C++ โดยสมการที่เพิ่มเติมในงานวิจัยนี้ คือ สมการที่ (15) (16) (17) (18) และ (19) ซึ่งเป็นสมการที่เกี่ยวข้องกับทฤษฎี Langmuir Hinshelwood ทั้งสิ้น ลำดับสุดท้ายคือการกำหนดขอบเขตของบริเวณส่วนผนังซึ่งแบ่งออกเป็นสองส่วน คือ ผนังที่ส่วนทำความร้อน (Wall 1) ถูกตั้งค่าให้อุณหภูมิคงที่ในช่วง 500 - 950 °C ตามอุณหภูมิที่ต้องการวิเคราะห์โดยผนังในส่วนนี้จะไม่เกิดปฏิกิริยาเคมีเกิดขึ้น และส่วนของตัวเร่งปฏิกิริยา (Wall 2) กำหนดให้มีปฏิกิริยาเกิดขึ้นภายในบริเวณนี้ และมีการป้อนความร้อน (Heat Flux) ให้กับผนังในส่วนนี้ด้วย โดยจำลองการให้ความร้อนจากเตาไฟฟ้าสู่ตัวเร่งปฏิกิริยา

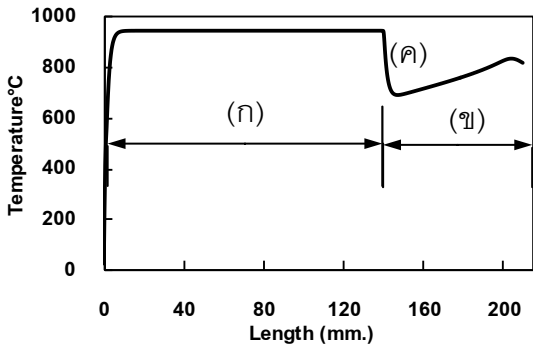
## 4. ผลการทดลอง

### 4.1 ปฏิกิริยาภายในตัวเร่งปฏิกิริยา

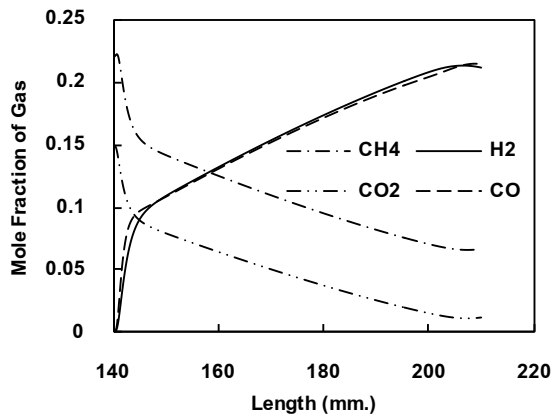
จากรูปที่ 5 อุณหภูมิที่เกิดขึ้นภายในแบบจำลอง โดยแบ่งเป็นสองส่วน คือ บริเวณส่วนทำความร้อนดังรูปที่ 5 (ก) เป็นอุณหภูมิคงที่ตามการทดลอง และบริเวณส่วนตัวเร่งปฏิกิริยาที่เกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้นดังรูปที่ 5 (ข) พบว่าเมื่อเริ่มเกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้น อุณหภูมิภายในตัวเร่งปฏิกิริยาจะลดลงอย่างรวดเร็ว ดังรูปที่ 5 (ค) และเป็นจุดที่เริ่มเกิดก๊าซ H<sub>2</sub> และ CO ด้วยเช่นกันดังรูปที่ 6 เนื่องจากปฏิกิริยาดรายรีฟอร์มมิ่งที่เกิดขึ้นเป็นปฏิกิริยาดูดความร้อน ซึ่งในขณะที่เกิดปฏิกิริยาอุณหภูมิภายในตัวเร่งปฏิกิริยาจะลดลงจนถึงจุดหนึ่ง หลังจากนั้นอุณหภูมิมบนตัวเร่งปฏิกิริยาจะเริ่มเพิ่มขึ้นอันเป็นผลจากผนังของตัวเร่งปฏิกิริยามี Heat Flux ที่ถูกกำหนดค่าไว้ ซึ่งค่า Heat Flux มีผลอย่างมากต่ออุณหภูมิและการเกิดปฏิกิริยาบนตัวเร่ง

## AEC-104

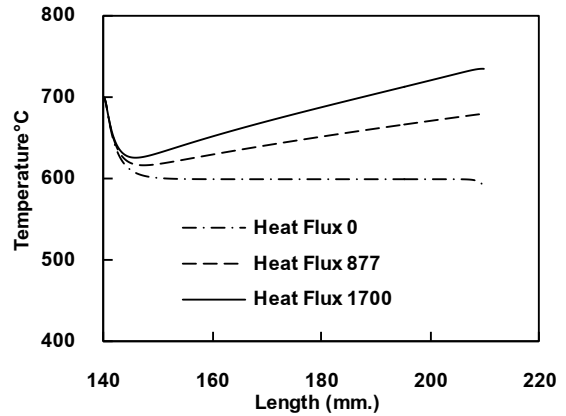
ปฏิกิริยาในแบบจำลองนี้ โดยจากรูปที่ 7 เมื่อปรับค่า Heat Flux เพิ่มขึ้น อุณหภูมิบนตัวเร่งปฏิกิริยาจะสูงขึ้นเช่นกัน มีผลทำให้เกิดปฏิกิริยาเพิ่มขึ้นตามไปด้วย ดังรูปที่ 8 ซึ่งผลการวิเคราะห์จากรูปถูกกำหนดให้อุณหภูมิของก๊าซเท่ากับที่ 700 °C หลังจากการทดสอบค่า Heat Flux ที่ใช้ในแต่ละช่วงพบว่า ค่า Heat Flux มีค่าสูงขึ้นตามช่วงอุณหภูมิดังรูปที่ 9



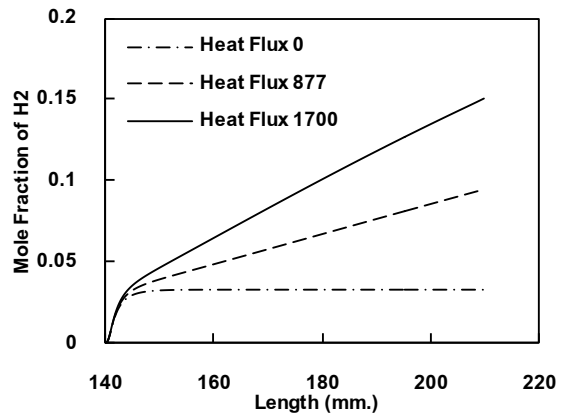
รูปที่ 5 ตัวอย่างอุณหภูมิที่เกิดขึ้นภายในแบบจำลอง (อุณหภูมิ 950 °C) โดย (ก) พื้นที่ส่วนทำความร้อน (ข) บริเวณส่วนตัวเร่งปฏิกิริยา และ (ค) บริเวณที่เริ่มเกิดปฏิกิริยา



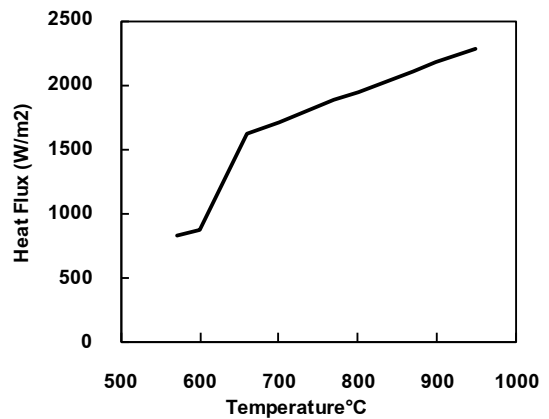
รูปที่ 6 ตัวอย่างค่าเศษส่วนโมลที่เปลี่ยนแปลงบนตัวเร่งปฏิกิริยาในแต่ละระยะ (อุณหภูมิ 950 °C)



รูปที่ 7 ผลเปรียบเทียบอุณหภูมิที่เกิดขึ้นบนตัวเร่งปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 700 °C เมื่อเปลี่ยนแปลงค่า Heat Flux 0 W/m<sup>2</sup> 877 W/m<sup>2</sup> และ 1700 W/m<sup>2</sup> ตามลำดับ



รูปที่ 8 ผลเปรียบเทียบค่าเศษส่วนโมลของก๊าซ H<sub>2</sub> บนตัวเร่งปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 700 °C เมื่อเปลี่ยนแปลง ค่า Heat Flux 0 W/m<sup>2</sup> 877 W/m<sup>2</sup> และ 1700 W/m<sup>2</sup> ตามลำดับ



รูปที่ 9 ค่า Heat Flux ที่ใช้ในแต่ละช่วงอุณหภูมิ

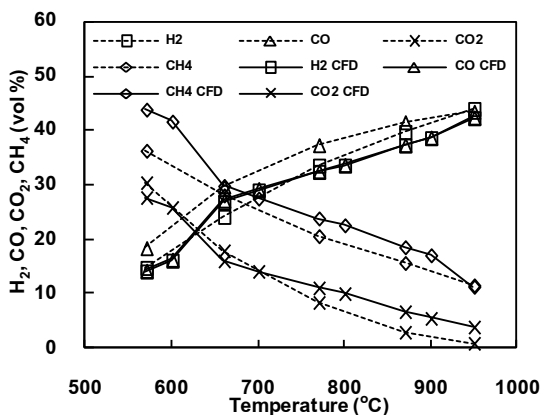
## AEC-104

### 4.2 การเปรียบเทียบจากผลการทดลอง

การเปรียบเทียบผลการคำนวณกับผลจากการทดลองดำเนินการโดยนำค่าเศษส่วนโมลของก๊าซที่ทางออกมาวิเคราะห์ผลด้วยการหาองค์ประกอบของก๊าซไฮโดรเจน ก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ ก๊าซมีเทน และก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ที่ทางออกด้วยสมการที่ (20) หลังจากนั้น นำผลการวิเคราะห์ที่ได้ไปเปรียบเทียบกับผลการทดลองของ [9]

$$\text{เปอร์เซ็นต์ของก๊าซ} = \frac{\text{ผลรวมของเศษส่วนโมล}}{\text{เศษส่วนโมลของก๊าซ}} \times 100 \quad (20)$$

จากรูปที่ 10 ผลการวิเคราะห์แบบจำลองเมื่อเปรียบเทียบกับผลการทดลองพบว่า ผลการวิเคราะห์จากแบบจำลองนี้มีแนวโน้มของกราฟไปในทิศทางเดียวกันเมื่อเปรียบเทียบกับผลที่ได้จากการทดลองที่อุณหภูมิตั้งแต่ 600 - 950 °C โดยเปอร์เซ็นต์ของก๊าซไฮโดรเจน และก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์ที่เกิดขึ้นเกิดขึ้นจากแบบจำลองมีผลที่ใกล้เคียงมาก ซึ่งมีข้อแตกต่างจากผลการทดลองที่เปอร์เซ็นต์ของก๊าซคาร์บอนมอนอกไซด์จากการทดลองจะเกิดมากกว่าก๊าซไฮโดรเจน ซึ่งอาจเกิดจากแบบจำลองนี้ได้ใช้สมการดรายรีฟอร์มมิงเพียงสมการเดียวเท่านั้น มีผลทำให้ผลการวิเคราะห์ของก๊าซทั้งสองมีค่าที่แตกต่างจากผลการทดลอง



รูปที่ 10 ผลเปรียบเทียบระหว่างผลที่ได้จากการทดลอง (สีดำ) กับผลที่ได้จากโปรแกรม CFD (สีน้ำเงิน)

### 5. สรุปและข้อเสนอนแนะ

จากผลการวิเคราะห์แบบจำลองแสดงให้เห็นถึงอุณหภูมิที่เกิดขึ้นบนตัวเร่งปฏิกิริยาซึ่งทำให้ทราบถึงจุดที่เริ่มเกิดปฏิกิริยาเคมีขึ้น และปัจจัยของค่า Heat Flux ที่เพิ่มขึ้นมีผลต่อการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิภายในตัวเร่งปฏิกิริยาที่เพิ่มขึ้นดังรูปที่ 6 และการเปลี่ยนแปลงของการผลิตก๊าซเพิ่มขึ้นดังรูปที่ 7 โดยแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมีนี้เมื่อเปรียบเทียบกับผลจากการทดลองพบว่าผลที่ได้มีแนวโน้มไปในทางเดียวกันกับการทดลอง ซึ่งสามารถนำข้อมูลจากการวิเคราะห์ที่ได้มาใช้ในการพัฒนาประสิทธิภาพการผลิตก๊าซไฮโดรเจนด้วยก๊าซชีวภาพต่อไป

ข้อเสนอนแนะในแบบจำลองการเกิดปฏิกิริยาเคมีนี้ค่า Heat Flux มีความสำคัญมากต่อผลการวิเคราะห์ที่เกิดขึ้น และการเพิ่มสมการเคมีย่อยให้มีความละเอียดมากขึ้นจะทำให้ผลการวิเคราะห์ที่ได้มีความแม่นยำมากยิ่งขึ้น

### 6. กิตติกรรมประกาศ

การวิจัยนี้ได้รับเงินอุดหนุนบางส่วนจากทุนอุดหนุนการวิจัยเพื่อทำวิทยานิพนธ์สำหรับนักศึกษาระดับบัณฑิตศึกษา บัณฑิตวิทยาลัย มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีพระจอมเกล้าพระนครเหนือ

### 7. เอกสารอ้างอิง

- [1] Lau, C.S., Lau, D., Allen, Tsolakis, A., Golunski, S.E. and Wyszynski, M.L. (2012). Biogas Upgrade to Syngas Through Thermochemical Recovery Using Exhaust Gas Reforming, *Biomass and Bioenergy*, vol. 40, May 2012, pp. 86 – 95.
- [2] สำนักงานนโยบายและแผนพลังงาน (สนพ.) กระทรวงพลังงาน. *ก๊าซชีวภาพ (Biogas)*, [ระบบออนไลน์], แหล่งที่มา <http://www.eppo.go.th>, เข้าดูเมื่อวันที่ 20/01/2557.

## AEC-104

- [3] Izquierdo, U., Barrio, V.L., Cambra, J.F., Güemez, M.B. and Arias, P.L. (2013). Tri-reforming: A New Biogas Process for Synthesis Gas and Hydrogen Production, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 38(18), June 2013, pp. 7623 – 7631.
- [4] Wang, S., (Max) Lu, G.Q. and Millar, G.J. (1995). Carbon Dioxide Reforming of Methane To Produce Synthesis Gas over Metal-Supported Catalysts: State of the Art, *Energy & Fuels*, vol. 10, November 1995, pp. 896 – 904.
- [5] Hamed, M.R., Tsolakis, A. and Lau, A. (2014). CFD Investigation of On-board Biogas Upgrading, paper presented in *the 1<sup>st</sup> International Conference on Engineering Science and Innovative Technology (ESIT 2014)*, Krabi, Thailand.
- [6] Sylvestre, S.W.J. (2007). *A Numerical Study of an Autothermal Reformer for the Production of Hydrogen from Iso-octane*, Master Thesis, Department of Mechanical and Materials Engineering, Queen's University.
- [7] Hayes, R.E. and Kolaczkowski, S.T. (1997). *Introduction to Catalytic Combustion*, ISBN: 90-5699-092-6, Gordon and Breach Science Publ.
- [8] Ertl, G. Helmut, K., Schüth, F. and Weitkamp, J. (2008). *Handbook of Heterogeneous Catalysis*, 2<sup>nd</sup> edition, ISBN: 978-3-527-31241-2, Wiley-VCH, Weinheim.
- [9] Lau, C.S., Tsolakis, A. and Wyszynski, M.L. (2011). Biogas Upgrade to Syn-gas (H<sub>2</sub> eCO) via Dry and Oxidative Reforming, *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36(1), January 2011, pp. 397 – 404.