

วิเคราะห์ความแม่นยำในการหาค่าพารามิเตอร์โคงตอบสนองของการทดลองแทป

INVESTIGATION OF ACCURACY OF DIFFERENT PROCEDURES FOR ESTIMATING PARAMETER FROM TAP EXPERIMENT

นาย ศุภสิทธิ์ โอสวรรณรัตน์

นาย ชนานต์ อินทะนะ

รองศาสตราจารย์ ดร. ฝั่งผาย พรรณวดี

ภาควิชาวิศวกรรมเคมี, คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์

โทร. 02-942-8555 ต่อ 1212 โทรสาร.02-561-4621 E-mail. fengphi@ku.ac.th

บทคัดย่อ

โครงการงานวิศวกรรมนี้ศึกษาความแม่นยำในการประมาณค่าพารามิเตอร์ของโคงตอบสนองจากเทคนิคการทดลองแทป (TAP experiment) สำหรับกระบวนการดูดซับแบบผันกลับและไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง การประมาณค่าพารามิเตอร์สามารถทำได้ 2 วิธี ได้แก่ 1) การหาสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซก่อนแล้วจึงคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยา 2) การหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซและค่าคงที่อัตราเร็วของปฏิกิริยาไปพร้อมกัน การหาค่าพารามิเตอร์อาศัยการเทียบโคงตอบสนองที่ได้จากการทดลอง กับโคงตอบสนองที่ได้จากแบบจำลอง โดยการเทียบโคงตอบสนองมี 2 ประเภทได้แก่ 1) การเทียบโคงอัตราการไหลขาออกของก๊าซ และ 2) การเทียบโคงตอบสนองนอร์มัลไลซ์ สำหรับกรณีกระบวนการดูดซับแบบผันกลับและไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง ผลการศึกษาแสดงว่า ในแต่ละประเภทของโคง การประมาณหาค่าพารามิเตอร์ในวิธีที่ 1 ให้ความแม่นยำกว่าวิธีที่ 2 ส่วนสำหรับประเภทของโคงตอบสนองพบว่า การเทียบโคงอัตราการไหลขาออกของก๊าซให้การประมาณค่าพารามิเตอร์ที่มีความแม่นยำมากกว่าวิธีการเทียบโคงตอบสนองนอร์มัลไลซ์อย่างเห็นได้ชัด ในกรณีของกระบวนการดูดซับแบบผันกลับได้ การประมาณค่าพารามิเตอร์ในวิธีที่ 1 สามารถหาความสัมพันธ์ของค่าความคลาดเคลื่อนของค่าคงที่ปฏิกิริยาของการดูดซับและการคายซับได้ด้วยสมการเส้นตรงซึ่งเป็นฟังก์ชันกับค่าคงที่ของการดูดซับและการคายซับ

คำสำคัญ : สัมประสิทธิ์การแพร่, ค่าคงที่อัตรา, การเทียบโคง

Abstract

This project investigates accuracy of estimated parameters from TAP pulse response data for the first-order irreversible/reversible reaction. The gas diffusivity and reaction rate constant were determined by using two different procedures including 1) determination of gas

diffusivity before the reaction rate constant and 2) determination of the gas diffusivity and the reaction rate constant simultaneously from one response. Estimation of parameters can be done by fitting of the experimental response and the model response. The types of response used for the fitting include the exit flow rate curve fitting and the unit-area normalized response. For reversible/irreversible reaction case, the gas diffusivity and rate constant obtained from the first procedure was found to be more accurate than those obtained from the second procedure. For the case of the first-order reversible reaction, the estimated parameters from the first procedure show that the deviation is proportional to the square of the desorption rate constant and to the reciprocal of the adsorption rate constant

Keyword : Gas diffusivity, kinetic rate constant, fitting curves

1. คำนำ

แทป (temporal analysis of product : TAP) เป็นเทคนิคที่ได้รับการยอมรับและถูกใช้มากขึ้นอย่างต่อเนื่อง ในการศึกษาจลนพลศาสตร์เคมีซึ่งมีตัวทำปฏิกิริยาเป็นก๊าซและตัวเร่งปฏิกิริยาเป็นของแข็ง การทดลองแทป (TAP experiment) ทำโดยการฉีดก๊าซปริมาณน้อยในลักษณะพัลส์ (pulse) เข้าไปในปฏิกรณ์ขนาดเล็ก (microreactor) อย่างรวดเร็วซึ่งภายในปฏิกรณ์บรรจุตัวเร่งปฏิกิริยาที่เป็นของแข็ง และที่ทางออกของปฏิกรณ์รักษาความดันไว้ต่ำมาก โดยโมเลกุลของก๊าซแต่ละชนิดที่ออกจากปฏิกรณ์จะถูกตรวจวัดด้วยเครื่องแมสสเปกโตรมิเตอร์ (mass spectrometer) และแสดงข้อมูลเป็นโคงตอบสนอง (response) ที่เป็นฟังก์ชันของเวลา ความเข้มของโคงตอบสนองจะเป็นสัดส่วนโดยตรงกับอัตราการไหลขาออกของก๊าซ โดยขนาดและรูปร่างของโคงตอบสนองจะขึ้นกับลักษณะของการถ่ายโอน (transport characteristic) และจลนพลศาสตร์เคมี (chemical kinetics) ของระบบเท่านั้น (Gleaves, J. T 1997)

ปฏิกรณ์แบบที่นิยมใช้แบ่งตามการบรรจุตัวเร่งปฏิกิริยา ดังนี้คือ ปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซน (one-zone reactor) และปฏิกรณ์แบบสามโซน (three-zone reactor) ปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซนเป็นปฏิกรณ์ที่บรรจุด้วยตัวเร่งปฏิกิริยาหรืออนุภาคเฉื่อย (inert particle) อย่างสม่ำเสมอทั่วทั้งปฏิกรณ์ ปฏิกรณ์ชนิดสามโซนเป็นปฏิกรณ์ที่โซนตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ระหว่างโซนอนุภาคเฉื่อย อนุภาคเฉื่อยอยู่ในโซนที่หนึ่ง (ทางเข้าของปฏิกรณ์) และโซนที่สาม (ทางออกของปฏิกรณ์) โดยมีตัวเร่งปฏิกิริยาอยู่ในโซนที่สอง ข้อดีของปฏิกรณ์ชนิดนี้คือ การกระจายของอุณหภูมิในโซนตัวเร่งปฏิกิริยาสม่ำเสมอกว่าปฏิกรณ์แบบหนึ่งโซน แต่แบบจำลองทางคณิตศาสตร์จะมีความยุ่งยากกว่า

แปลผลข้อมูลในเชิงปริมาณหรือการหาพารามิเตอร์ของการถ่ายโอนและจลนพลศาสตร์ ทำโดยการเปรียบเทียบโค้งอัตราการไหลที่ได้จากการทดลองกับ โค้งอัตราการไหลที่คำนวณจากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (model response) ซึ่งใช้หลักการการวิเคราะห์การถดถอย (regression analysis)

การประมาณค่าพารามิเตอร์สามารถทำได้ 2 วิธี สำหรับวิธีแรกสามารถทำได้โดยการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซก่อน แล้วจึงหาค่าคงที่ปฏิกิริยาภายหลังอีกวิธีหนึ่งทำได้โดยการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซไปพร้อมกับการคำนวณค่าคงที่ปฏิกิริยา

การเทียบโค้งเพื่อประมาณค่าพารามิเตอร์สามารถทำได้ 2 ประเภทได้แก่ 1) การเทียบโค้ง Unit Areas Normalize คือสนใจเฉพาะขนาดของรูปโค้งและ 2) การเทียบโค้ง Exit flow rate ซึ่งจะสนใจทั้งขนาดและรูปร่างของโค้งซึ่งการเทียบโค้งทั้งสองประเภทก็เป็นที่น่าสนใจถึงความแม่นยำในการนำไปใช้ ว่าวิธีไหนจะให้ความแม่นยำมากกว่ากัน

2. แบบจำลองทางคณิตศาสตร์

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์สำหรับกระบวนการแพร่สามารถแสดงโดยสมการอนุพันธ์มวลของเฟสภาคก๊าซในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (Partial differential equation, PDE) ดังนี้

$$\varepsilon_b \frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{eA} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \quad (1)$$

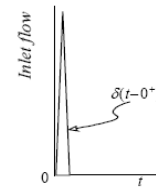
โดยที่ C_A คือ ความเข้มข้นของก๊าซ A (โมล/ลูกบาศก์เซนติเมตร), D คือ สัมประสิทธิ์การแพร่แบบนูดเซน (Knudsen) ของก๊าซ A (ตารางเซนติเมตร/วินาที), t คือเวลา (วินาที), Z คือ พิกัดตามแนวความยาวของปฏิกรณ์ (เซนติเมตร), ε_b คือ เศษส่วนช่องว่าง (fractional voidage) ของเบด (bed) การหาผลเฉลยของการทดลองผลตอบสองแบบ ซึ่งอธิบายด้วยแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ดังสมการที่ (1) สามารถทำได้โดยอาศัยสภาวะเริ่มต้น (initial condition, I.C.) สภาวะขอบ

(boundary condition, B.C.) ที่สอดคล้องกับลักษณะทางกายภาพของระบบซึ่งอธิบายได้เป็น

$$t = 0 \quad C_A = 0 \quad (2)$$

$$z = 0 \quad c_A = \delta(t - 0^+) \frac{N_{pA}}{\varepsilon_b A} \quad (3)$$

เมื่อ $\delta(t - 0^+)$ คือฟังก์ชันเดลตาตั้งรูป

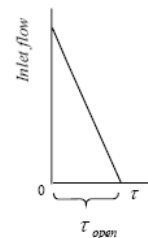


รูปที่ 2.1 อัตราการไหลขาเข้าของก๊าซที่เป็นฟังก์ชันเดลตาที่เวลา 0^+

ในกรณีที่อธิบายอัตราการไหลขาเข้าของก๊าซด้วยฟังก์ชันขาเข้าที่ไม่ใช่ฟังก์ชันเดลตา สมการที่ (3) จะถูกแทนด้วยสมการ (4)

$$z = 0 \quad c_A = X(t - 0^+) \frac{N_{pA}}{\varepsilon_b A} \quad (4)$$

โดยที่ $X(t - 0^+)$ เป็นฟังก์ชันสามเหลี่ยมตั้งรูป



รูปที่ 2.2 เป็นฟังก์ชันขาเข้าที่มีลักษณะเป็นรูปสามเหลี่ยม

สำหรับกระบวนการแพร่ที่มีการดูดซับแบบผันกลับได้สามารถอธิบายได้โดย (Phanawadee, P., 1999)

$$\varepsilon_b \frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{eA} \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} - a_s S_v (1 - \varepsilon_b) (k_a C_A - k_d \theta_A) \quad (5)$$

และ
$$\frac{\partial \theta_A}{\partial t} = k_a C_A - k_d \theta_A \quad (6)$$

โดยที่ k_a คือ ค่าคงที่อัตราเร็วการดูดซับ (เซนติเมตร/โมล วินาที), k_d คือ ค่าคงที่อัตราเร็ว (วินาที⁻¹), θ_A คือ สัดส่วนที่ว่างบนตัวเร่งปฏิกิริยา, S_v คือ พื้นที่ผิวของตัวเร่งปฏิกิริยาต่อปริมาตรของตัวเร่งปฏิกิริยา (เซนติเมตร⁻¹), a_s คือ ความเข้มข้นของแอกทีฟไซต์ (โมล/ตารางเซนติเมตร). ในการ

คำนวณมักจรูปของสมการให้อยู่ในรูปของเทอมไร้หน่วยโดยสมการที่ (5) และ (6) สามารถเขียนในเทอมไร้หน่วยได้เป็น (Gleaves, J. T. 1997)

$$\frac{\partial c_A^*}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 c_A^*}{\partial \xi^2} - k_a^* c_A^* + k_d^* \theta_A^* \quad (7)$$

และ
$$\frac{\partial \theta_A^*}{\partial \tau} = k_a^* c_A^* - k_d^* \theta_A^* \quad (8)$$

เมื่อ
$$k_a^* = k_a \frac{\varepsilon_b L^2}{D_{eA}}, \quad k_d^* = \frac{a_s S_v (1 - \varepsilon_b) k_d}{\varepsilon_b} \quad (9)$$

$$k_d^* = k_d \frac{\varepsilon_b L^2}{D_{eA}} \quad (10)$$

$$\theta_A^* = \alpha \theta_A \quad (11)$$

$$\alpha = (1 - \varepsilon_b) AL \frac{a_s S_v}{(N_{pA} / S_{total})} \quad (12)$$

โดยในการหาผลเฉลยสมการที่ (7) และ (8) จะต้องใช้สภาวะเริ่มต้นและสภาวะขอบดังต่อไปนี้

สภาวะเริ่มต้น $t = 0 \quad C_A^* = 0 \quad (13)$

$$t = 0 \quad \theta_A^* = 0 \quad (14)$$

สภาวะขอบ $\xi = 0 \quad \frac{\partial c_A^*}{\partial \xi} = \delta(\tau - 0^+) \quad (15)$

$$t = 0 \quad C_A^* = 0 \quad (16)$$

3. การคำนวณ

การคำนวณจะอยู่บนพื้นฐานของการเทียบเคียงคำตอบของอัตราเร็วไหลขาออกของก๊าซโดยสมมติให้โค้งคำตอบที่สร้างจากฟังก์ชันสามเหลี่ยมเป็นโค้งที่ได้จากการทดลอง ในการคำนวณหาค่าพารามิเตอร์สามารถแบ่งออกได้เป็น 2 วิธีคือ 1) การหาค่าพารามิเตอร์ทั้งสามพร้อมกัน และ 2) การหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ก่อนแล้วจึงหาค่าที่อัตราเร็วการดูดและคายซับ

วิธีที่ 1. เป็นการหาค่าพารามิเตอร์ทั้งสามค่าพร้อมกันซึ่งทำได้โดยกำหนดค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ เพื่อนำไปสร้างโค้งคำตอบจากฟังก์ชันสามเหลี่ยมหลังจากนั้นนำโค้งคำตอบที่ได้ไปเทียบกับโค้งคำตอบที่ได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ซึ่งโค้งคำตอบที่ได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์จะถูกสร้างขึ้นโดยการสุ่มค่าพารามิเตอร์ต่างๆทั้งสามตัวจนกว่าโค้งที่ได้จะทับกับโค้งคำตอบที่ได้จากฟังก์ชันสามเหลี่ยมมากที่สุด

วิธีที่ 2. เป็นการคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ก่อนแล้วจึงคำนวณค่าคงที่อัตราเร็วการดูดและคายซับซึ่งทำได้โดยสร้างโค้งคำตอบที่มีการกระบวนกรการแพร่เพียงอย่างเดียวไปเทียบกับโค้งคำตอบที่ได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์โดยใช้หลักเกณฑ์เหมือนกับวิธีแรกแต่มีเพียงพารามิเตอร์เดียว เพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ออกมาก่อน หลังจากนั้นจึงทำการสร้างโค้งคำตอบที่ได้จากฟังก์ชันสามเหลี่ยมให้มีค่าพารามิเตอร์ครบทั้งสามตัวนำไปเทียบกับโค้งที่ได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ซึ่งโค้งที่ได้จากแบบจำลองคณิตศาสตร์นั้นจะทำการสุ่มเฉพาะค่าคงที่อัตราเร็วการดูดและคายซับเท่านั้น ในส่วนของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่จะใช้ค่าที่ได้มาจากการคำนวณที่กล่าวมาข้างต้น เมื่อโค้งทั้งสองทับกันสนิทมากที่สุดแล้ว

การพิจารณาความแม่นยำในการคำนวณค่าพารามิเตอร์สามารถทำได้ดังต่อไปนี้

$$\Delta D_{eA} (\%) = \frac{D_{eA,est} - D_{eA,real}}{D_{eA,real}} \times 100 \quad (17)$$

$$\Delta k_a (\%) = \frac{k_{a,est} - k_{a,real}}{k_{a,real}} \times 100 \quad (18)$$

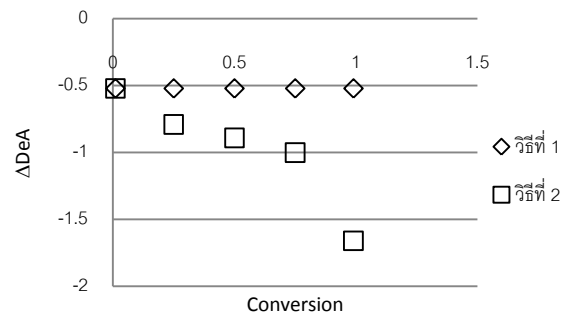
$$\Delta k_d (\%) = \frac{k_{d,est} - k_{d,real}}{k_{d,real}} \times 100 \quad (19)$$

โดยที่หาค่าพารามิเตอร์เหล่านี้มีค่าน้อยหมายถึงการคำนวณนั้นมีความแม่นยำสูงนั่นเอง

4. ผลการศึกษาและวิจารณ์

4.1 สำหรับกระบวนการดูดซับแบบไม่ผันกลับได้อันดับหนึ่ง

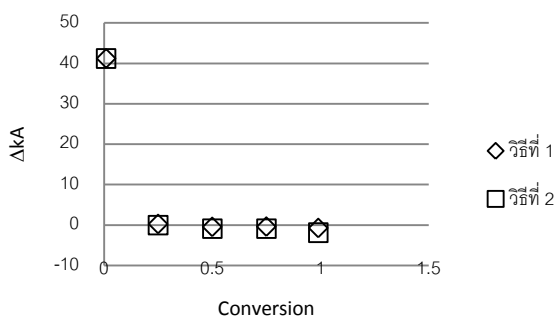
4.1.1 เปรียบเทียบความแม่นยำในการหาค่าพารามิเตอร์ของทั้งสองวิธี



รูปที่ 4.1 เปรียบเทียบความแม่นยำในการหาค่าพารามิเตอร์ ΔD_{eA} ของทั้งสองวิธี

จากรูปที่ 4.1 พบว่าวิธีการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่หนึ่งค่า ΔD_{eA} จะมีค่าเข้าใกล้ศูนย์มากกว่าการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่สองซึ่งค่า

ΔD_{eA} มีแนวโน้มห่างจากศูนย์เมื่อค่า conversion สูงขึ้น แสดงว่าการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่หนึ่งมีความแม่นยำมากกว่าแบบที่สองเนื่องจากการหาค่าพารามิเตอร์วิธีที่หนึ่งนั้นจะทำการหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ออกมาก่อน ซึ่งจะทำให้ไม่ว่าค่า conversion จะเป็นอย่างไรจะไม่ส่งผลถึงค่าความแม่นยำในการหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ซึ่งสังเกตได้จากค่า ΔD_{eA} ที่คงที่ ณ conversion ต่างๆ แต่ในการหาค่าพารามิเตอร์วิธีที่สองนั้น จะทำโดยการหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ไปพร้อมๆกับการหาค่าคงที่อัตราเร็วปฏิกิริยาไว้มีดีจึงทำให้ค่าความแม่นยำในการหาขึ้นอยู่กับค่า conversion ด้วย เพราะการคำนวณค่าพารามิเตอร์ด้วยวิธีนี้นั้นมีความแม่นยำที่น้อยลงหรืออาจไม่สามารถคำนวณได้ เนื่องจากการคำนวณแบบนี้ไม่สามารถแยกพารามิเตอร์ต่างๆออกจากกันได้



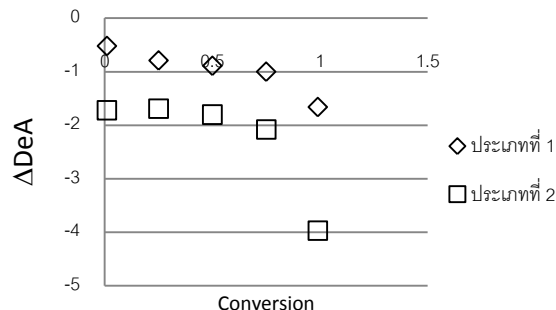
รูปที่ 4.2 เปรียบเทียบความแม่นยำในการหาค่าพารามิเตอร์ Δk_A ของทั้งสองวิธี

จากรูปที่ 4.2 พบว่าที่ conversion ค่าจะมีค่า Δk_A สูงทำและจะมีค่าน้อยลงเมื่อค่า conversion สูงขึ้นแสดงให้เห็นว่าทั้งสองวิธีที่คำนวณ ณ ค่า conversion ค่าจะให้ความคลาดเคลื่อนสูง แต่วิธีการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่หนึ่งค่า Δk_A จะมีค่าเข้าใกล้ศูนย์มากกว่าการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่สองแสดงให้เห็นว่า ความแม่นยำในการคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ในแบบที่หนึ่งมีความแม่นยำกว่าคำนวณหาค่าพารามิเตอร์ในแบบที่สองเนื่องจากในการคำนวณแบบที่หนึ่งจะส่งผลให้ค่า d_1 ไม่เปลี่ยนแปลงเมื่อ conversion เปลี่ยน จึงทำให้ค่าที่คำนวณได้มีความแม่นยำสูงกว่าสังเกตได้จากค่า Δk_A ที่ต่ำกว่า ส่วนการคำนวณหาค่าพารามิเตอร์แบบที่สอง

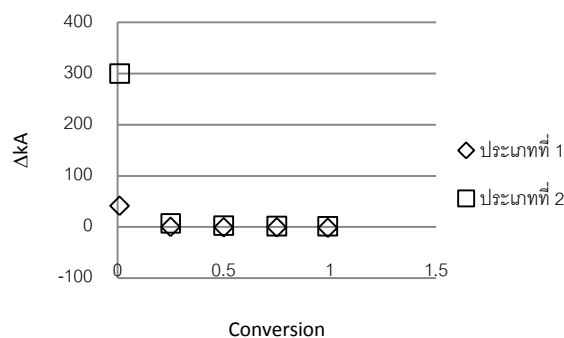
4.1.2 เปรียบเทียบความแม่นยำในวิธีการเทียบโค้งตอบสนอง

จากรูปที่ 4.3 จะเห็นได้ว่าการหาค่าพารามิเตอร์ด้วยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจะมีค่า ΔD_{eA} เข้าใกล้ศูนย์มากกว่าการเทียบโค้งตอบสนองของนอร์มัลไลซ์ แสดงว่าการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจะความแม่นยำกว่าการเทียบโค้งตอบสนองของนอร์มัลไลซ์ ซึ่งค่า ΔD_{eA} ยิ่งค่า conversion ค่าสูง ค่า ΔD_{eA} ยิ่งมีค่ามาก จึงทำให้ความ

แม่นยำในการประมาณค่าต่ำลง ด้วยสาเหตุที่ค่า conversion สูงกราฟที่ได้จากการนอร์มัลไลซ์ของอัตราการไหลขาออกจะมีความสูงของกราฟมากขึ้นจึงทำให้ค่า d_1 เบี่ยงเบนออกไปมากขึ้น



รูปที่ 4.3 เปรียบเทียบความแม่นยำในวิธีการเทียบโค้งตอบสนองในการหาค่าพารามิเตอร์ ΔD_{eA}

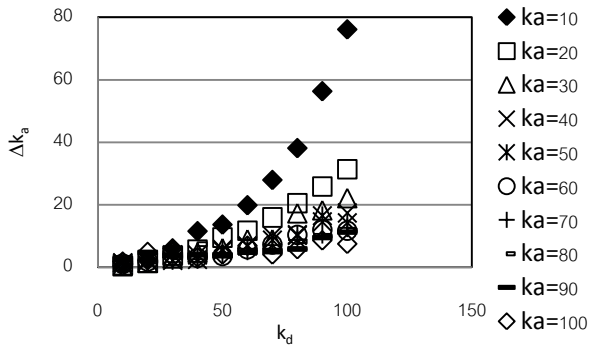


รูปที่ 4.4 เปรียบเทียบความแม่นยำในวิธีการเทียบโค้งตอบสนองในการหาค่าพารามิเตอร์ Δk_A

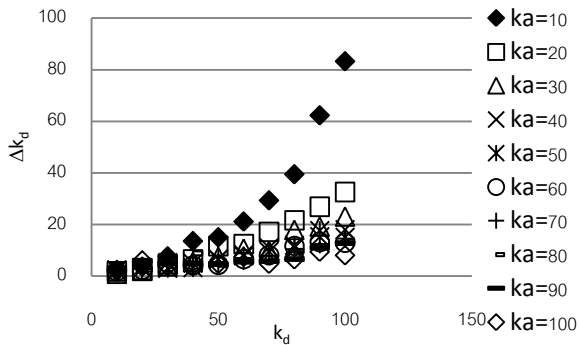
จากรูปที่ 4.4 จะเห็นได้ว่าการหาค่าพารามิเตอร์ด้วยการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจะมีค่า Δk_A เข้าใกล้ศูนย์มากกว่าการเทียบโค้งตอบสนองของนอร์มัลไลซ์ แสดงว่าการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจะความแม่นยำกว่าการเทียบโค้งตอบสนองของนอร์มัลไลซ์ด้วยสาเหตุที่ค่า conversion สูงกราฟที่ได้จากการนอร์มัลไลซ์ของอัตราการไหลขาออกจะมีความสูงของกราฟมากขึ้น จึงทำให้ค่า d_1 เบี่ยงเบนออกไปมากขึ้นจึงส่งผลกระทบต่อค่า $k_{A,est}^*$

4.2 สำหรับกระบวนการดูดซับแบบผันกลับได้

4.2.1 วิเคราะห์การประมาณค่าพารามิเตอร์ด้วยวิธีการคำนวณหาสัมประสิทธิ์การแพร่ก่อนแล้วจึงหาค่าคงที่อัตราการดูดซับและคายซับที่มีผลต่อความแม่นยำ



รูปที่ 4.5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง Δk_a กับ k_d^* ในการประมาณค่าพารามิเตอร์ด้วยวิธีที่ 1



รูปที่ 4.6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง Δk_d กับ k_d^* ในการประมาณค่าพารามิเตอร์ด้วยวิธีที่ 1

จากรูปที่ 4.5 และ 4.6 จะเห็นได้ว่าที่ค่า k_d^* มีค่าสูงขึ้นจะทำให้ค่า Δk_a และ Δk_d มีความคลาดเคลื่อนสูงขึ้นไปด้วย โดยสังเกตจากจุดข้อมูลที่ดูออกจากค่าศูนย์ ทำให้ความแม่นยำที่ได้มีค่าน้อยลง และที่ค่า k_a^* สูงๆ กราฟจะยิ่งเบนเข้าใกล้ค่าศูนย์มากขึ้นแสดงให้เห็นว่าข้อมูลยังมีความแม่นยำมากขึ้น จะสังเกตเห็นได้ว่าค่า Δk_a และ Δk_d นั้นแปรผันตามค่า k_d^* และแปรผกผันกับค่า k_a^* โดยที่ยิ่งค่า k_d^* มาก ค่า Δk_a และ Δk_d จะสูง และยิ่งค่า k_a^* มากค่า Δk_a และ Δk_d จะต่ำ ซึ่งเมื่อเราทำการวิเคราะห์ข้อมูลจากกราฟต่อไปอีกเราจะพบว่าค่า Δk_a และ Δk_d มีความสัมพันธ์กับค่า k_d^* และ k_a^* ดังนี้

$$\Delta k_a = \left(\frac{0.0714452}{k_a^*} \right) \times (k_d^*)^2 \quad (20)$$

$$\Delta k_d = \left(\frac{0.087851}{k_a^*} \right) \times (k_d^*)^2 \quad (21)$$

5. สรุปผล

1. การคำนวณค่าพารามิเตอร์ โดยคำนวณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซก่อนแล้วจึงคำนวณค่าคงที่ปฏิกิริยาภายหลัง จะให้ความแม่นยำสูงกว่าการคำนวณหาค่าคงที่ปฏิกิริยาและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่พร้อมกันทั้งในวิธีการเทียบโค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซและวิธีการเทียบโค้งตอบสนองของนอร์มัลไลซ์ซึ่งสอดคล้องกับ(พิชามาศ ดันเต็ก 2549)

2. จากการคำนวณหาสัมประสิทธิ์การแพร่ก่อนแล้วจึงหาค่าคงที่อัตราการดูดซับและคายซับพบว่าความแม่นยำในการประมาณค่าพารามิเตอร์จะแปรตามกำลังสองของค่าคงที่อัตราการดูดซับ และแปรผกผันกับค่าคงที่อัตราการคายซับแสดงว่ายิ่งค่าคงที่อัตราการดูดซับสูง และค่าคงที่อัตราการคายซับต่ำ จะทำให้ความแม่นยำในการประมาณค่าพารามิเตอร์ต่ำได้ผลลัพธ์ที่ได้สอดคล้องกับ(Phanawadee, P. 1999)

3. พบว่าวิธีการหาค่าพารามิเตอร์แบบที่หนึ่งจะมีความแม่นยำมากกว่าแบบที่สองในกรณีที่ค่า k_a^* น้อยกว่า k_d^* แต่กรณีที่ k_d^* มีค่าสูงหรือมากกว่า k_a^* มาก วิธีการประมาณค่าพารามิเตอร์จะไม่ส่งผลต่อค่าความแม่นยำในการหาค่า k_d^* หรือ Δk_d เมื่อเทียบกับ k_a^* หรือ Δk_a

6. กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบพระคุณคณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ที่มอบเงินทุนสนับสนุนและเอื้อเฟื้อสถานที่ในการทำโครงการวิศวกรรมฉบับนี้

ขอขอบพระคุณ รศ. ดร. ผึ้งผาย พรธรวดี ประธานกรรมการที่ปรึกษา รศ. ดร. เมตตา เจริญพานิช กรรมการที่ปรึกษา และ รศ. ดร. สุนันท์ ลิ้มตระกูลกรรมการที่ปรึกษา ที่กรุณาให้คำปรึกษาเกี่ยวกับแนวทางในการทำโครงการวิศวกรรมฉบับนี้

ขอขอบคุณนิสิตปริญญาโททุกท่านที่คอยให้ความช่วยเหลือและให้คำแนะนำแนวงานโครงการฉบับนี้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี

เอกสารอ้างอิง

- พิชามาศ ดันเต็ก. 2549. การวิเคราะห์การใช้งานได้ของฟังก์ชันไดแรกเลตตามแบบจำลองแบบโดยการจำลองแบบเชิงตัวเลขวิทยานิพนธ์ปริญญาโท,มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์
- Gleaves, J. T., G. S. Yablonskii, P. Phanawadee and Y. Schuurman. 1997. TAP-2: Aninterrogative kinetic approach. **Appl. Catal. A: General.** 160: 55-88.
- Phanawadee, P., G. S. Yablonsky, P. Preechasanongkit and K. Somapa. 1999. A new correlationfor determination of the effective