บทที่ 4
ขั้นตอนที่ใช้ทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

สำหรับขั้นตอนการทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์มีขั้นตอนที่สำคัญดังต่อไปนี้

4.1 การปรับหน่วย

จะต้องปรับหน่วยให้มีการสอดคล้องกันทั้งระบบของสมการดุลมวลสาร (Material balance equation) ในสมการ 3-9 ถึง 3-16 ดังตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 หน่วยที่ใช้ในการดุลมวลสาร

ชนิด	หน่วยที่ใช้
อัตราการไหล	ลิตร / นาที
ความเข้มข้น	โมล / กิโลกรัม
ความหนาแน่น	กิโลกรัม / ลิตร
ปริมาตร	ลิตร
ค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_3, k_5-k_8)	ลิตร / โมล . นาที
ค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_4)	นาที$^{-1}$

ในงานวิจัยนี้จะนำเงื่อนไขของข้อมูลจริงจากการผลิตในโรงงานอุตสาหกรรมที่เป็นขั้นตอนของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชันที่อุณหภูมิ 234 °C กำลังการผลิตเป็น 115 ตัน/วัน และสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่ 1 : 2.36 (จากตาราง ก-9 และ ก-11 ในภาคผนวก ก) พร้อมกับนำค่าคงที่สมดุลของปฏิกิริยา (K_1 ถึง K_8 จากตาราง ก-13 ในภาคผนวก ก) ซึ่งเป็นตัวแปรที่ทราบค่ามาใส่ในในสมการ 3-9 ถึง 3-16 ส่วนตัวแปรที่ไม่ทราบค่าก็จะติดตัวแปรนั้นไว้ ซึ่งเมื่อแทนแล้วจะได้ดังสมการต่อไปนี้

$$(11{,}115*2.94)/(60*1.13)-(8{,}336*e_m)/(60*1.13)+$$
$$(1.13*46{,}890)*[(-1)*k_1*(2*e_m*g-e_g*m/0.3)-$$
$$k_2*(e_m*e_g-2*z*m/0.15)] = 0 \quad (4\text{-}1)$$

$$(-8{,}336*e_g)/(60*1.13)+(1.13*46{,}890)*[2*k_1*e_m*g-$$
$$k_1*e_g*m/0.3-k_2*e_m*e_g+2*k_2*z*m/0.15-2*k_3*e_g\text{^}2+$$
$$8*k_3*z*g/0.5-k_4*e_g/1.13-2*k_5*e_g*g-k_6*e_g\text{^}2+$$
$$2*k_7*e_c*g-k7*e_g*w/2.5-k_8*e_c*e_g+2*k_8*z*w/1.25] = 0 \quad (4\text{-}2)$$

$$(-8{,}336*m)/(60*1.13)-(2{,}779*10.47)/(60*1.13)+$$
$$(1.13*46{,}890)*[2*k_1*e_m*g-k_1*e_g*m/0.3+$$
$$k_2*e_m*e_g-2*k_2*z*m/0.15] = 0 \quad (4\text{-}3)$$

$$(11{,}115*6.93)/(60*1.13)-(8{,}336*g)/(60*1.13)-$$
$$(2{,}779*10.47)/(60*1.13)+(1.13*46{,}890)*[-2*k_1*e_m*g+$$
$$k_1*e_g*m/0.3+k_3*e_g\text{^}2-4*k_3*z*g/0.5-$$
$$2*k_7*e_c*g+k_7*e_g*w/2.5] = 0 \quad (4\text{-}4)$$

$$(-8{,}336*z)/(60*1.13)+(1.13*46{,}890)*[k_2*e_m*e_g-$$
$$2*k_2*z*m/0.15+k_3*eg\text{^}2-4*k_3*z*g/0.5+$$
$$k_8*e_c*e_g-2*k_8*z*w/1.25] = 0 \quad (4\text{-}5)$$

$$(-8{,}336*e_c)/(60*1.13)+(1.13*46{,}890)*[k_4*e_g/1.13+$$
$$2*k_5*e_g*g+k_6*e_g\text{^}2-2*k_7*e_c*g+k_7*e_g*w/2.5-$$
$$k_8*e_c*e_g+2*k_8*z*w/1.25] = 0 \quad (4\text{-}6)$$

$(-8,336*w)/(60*1.13)+(2,779*0.87)/(60*1.13)+$

$(1.13*46,890)*[2*k_7*e_c*g-k_7*e_g*w/2.5+k_8*e_c*e_g-$

$2*k_8*z*w/1.25] = 0 \quad (4\text{-}7)$

$(-8,336*\dot{g})/(60*1.13)+(1.13*46,890)*[2*k_5*e_g*g+$

$k_6*e_g\text{^}2] = 0 \quad (4\text{-}8)$

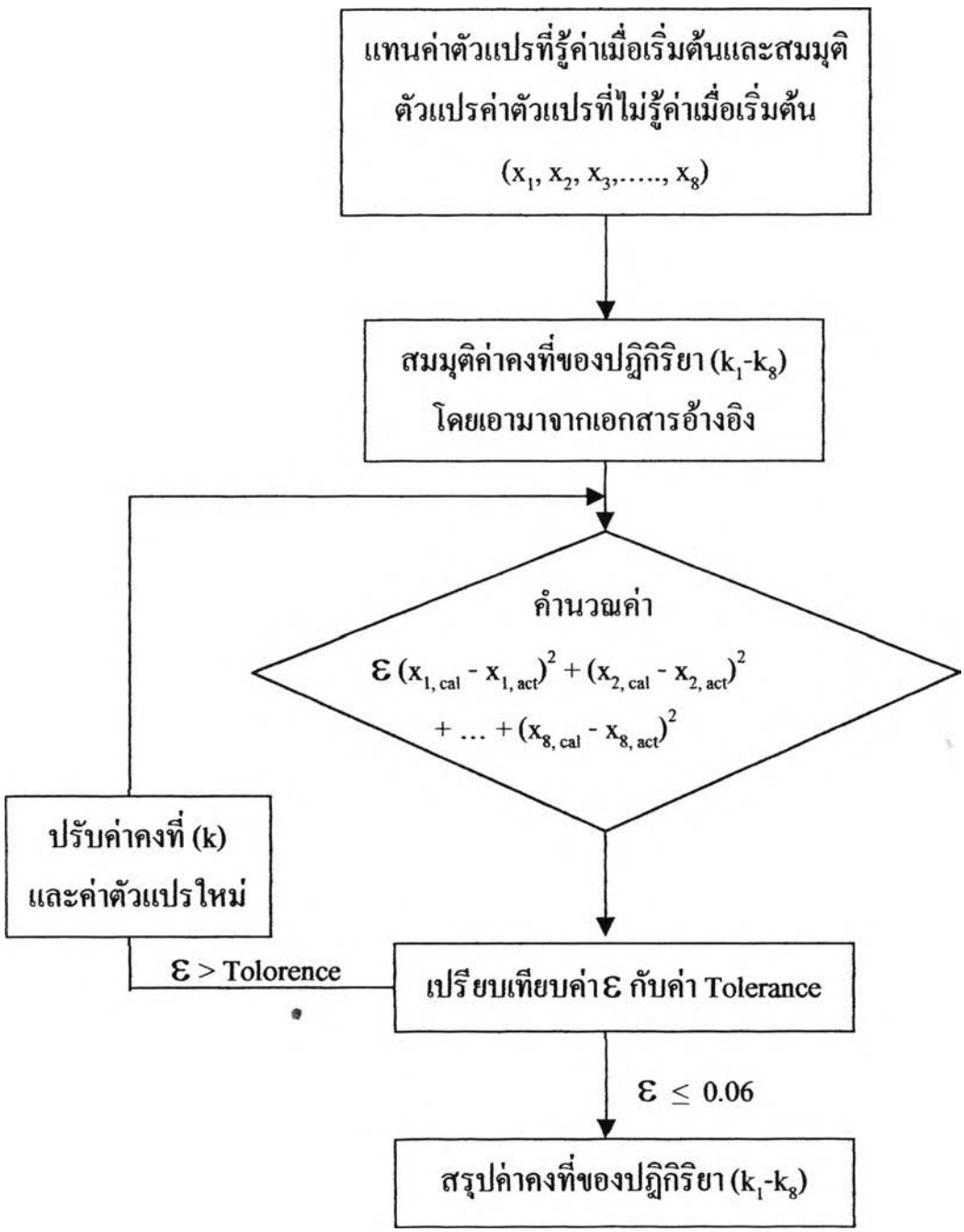
โดยรายละเอียดของค่าคงที่บางตัวที่ควรทราบในสมการดังกล่าวข้างต้นคือ

1. ค่า 11,115 คือ อัตราการไหลของดีเอ็มทีและอีจีขาเข้า (หน่วย กิโลกรัม/ชั่วโมง)
2. ค่า 2,779 คือ อัตราการไหลของไอขาออก (หน่วย กิโลกรัม/ชั่วโมง)
3. ค่า 8,336 คือ อัตราการไหลของดีจีทีขาออก (หน่วย กิโลกรัม/ชั่วโมง)
4. ค่า 46,890 คือ ปริมาตรของสารผสมในส่วนที่ทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟีเคชัน (หน่วย ลิตร)
5. ค่า 1.13 คือ ความหนาแน่นของสารผสมในส่วนที่ทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟีเคชัน (หน่วย กิโลกรัม/ลิตร)
6. ค่า 60 คือ เวลา (หน่วย นาที)

4.2 การออปติไมซ์ เพื่อหาค่าคงที่ของปฏิกิริยา(k_1-k_8) ที่อุณหภูมิ 234 °C

สำหรับในงานวิจัยนี้จะใช้โปรแกรมแม็ทแลบ (MATLAB) ซึ่งมีทูลบ็อกซ์ (Toolbox) สำหรับช่วยออปติไมซ์หาค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_8) ซึ่งปรากฏอยู่ในสมการแบบจำลองที่กล่าวถึงข้างต้น(สมการ 4-1 ถึง 4-8) โดยอุณหภูมิเริ่มต้นที่สนใจนำมาศึกษาคือ 234 °C เนื่องจากเป็นอุณหภูมิของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟีเคชันที่ทางโรงงานจริงเลือกใช้ตามสมการ 4-1 ถึง 4-8 ข้างต้น ทั้งนี้หลักการของการกำหนดค่าคงที่ดังกล่าวได้สรุปไว้ดังที่ได้แสดงในแผนภูมิ (Diagram) ในรูปที่4-1 ต่อไปนี้ สำหรับรายการพิมพ์ออกของโปรแกรมและตัวโปรแกรมแสดงใน ค.1 (ภาคผนวก ค)

รูปที่4-1 แผนภูมิแสดงการออบติไมซ์เพื่อหาค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_8)



เมื่อ x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, และ x_8 คือตัวแปร e_m, g, e_g, m, z, e_c, w และ g* ตามลำดับ

4.3 การปรับค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_8) โดยใช้สมการอาร์เรเนียส

เมื่อได้ค่าคงที่ของปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 234 °C แล้วจะนำค่าดังกล่าวเป็นค่าอ้างอิงเพื่อนำไปใช้หาค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_8) ที่อุณหภูมิต่างๆ ที่สนใจคือ 150 °C 180 °C 200 °C 220 °C 225 °C 240 °C และ 250 °C โดยอาศัยหลักการของอาร์เรเนียส โดยรายละเอียดแสดงในตารางที่ ก-10 (ภาคผนวก ก)

4.4 การหาค่าตัวแปรสำหรับที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยใช้ระเบียบวิธีการหารากของระบบสมการแบบของนิวตัน–ราฟสัน

เมื่อได้ค่าคงที่ของปฏิกิริยา (k_1-k_8) ที่อุณหภูมิต่าง ๆ แล้วก็หาค่าตัวแปรสำหรับที่อุณหภูมินั้นโดยใช้ระเบียบวิธีการหารากของระบบสมการแบบของนิวตัน-ราฟสัน ซึ่งในงานวิจัยนี้จะใช้โปรแกรมแม็ทเมติกา (MATHEMATICA) เพื่อช่วยในคำนวณ สำหรับรายการพิมพ์ออกของโปรแกรมและตัวโปรแกรมแสดงใน ค.2 (ภาคผนวก ค)