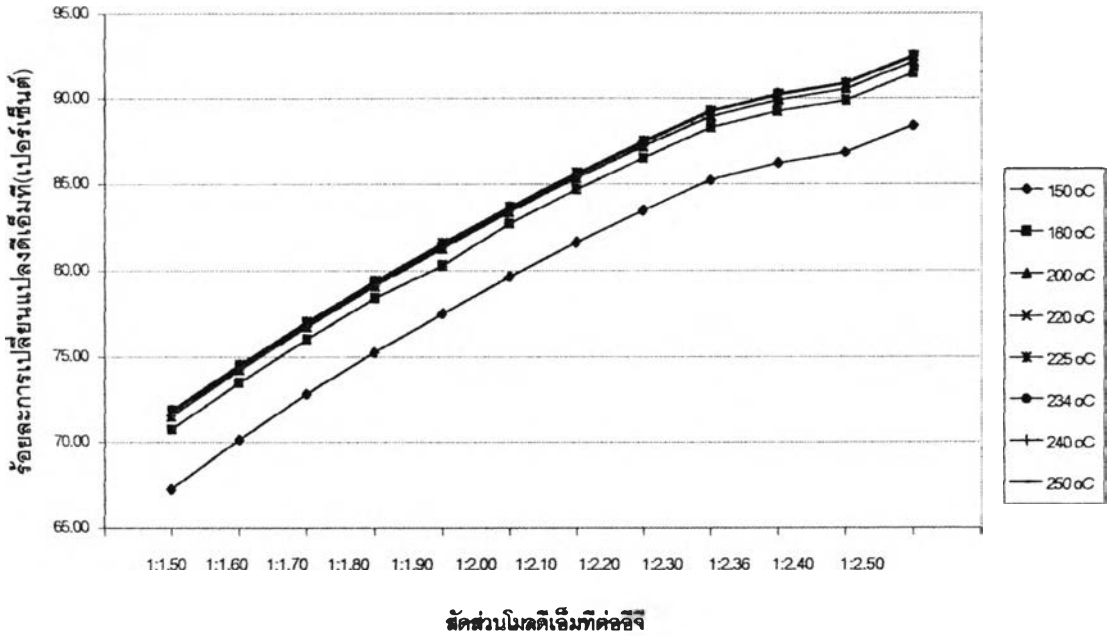
บทที่ 5

การทดสอบแบบจำลอง และการวิเคราะห์

สำหรับในบทที่ 5 นี้ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่พัฒนาขึ้นจะได้ถูกนำมาทดสอบใน 2 เงื่อนไขที่กล่าวไว้ในขอบเขตการวิจัยบทที่ 1 ซึ่งผลการทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่พัฒนาขึ้นดังกล่าวจะได้นำเสนอต่อไปในแต่ละหัวข้อดังนี้

5.1 ผลการทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่อุณหภูมิคงที่ที่ 150°C 180°C 200°C 220°C 225°C 234°C 240°C และ 250°C ตามลำดับ

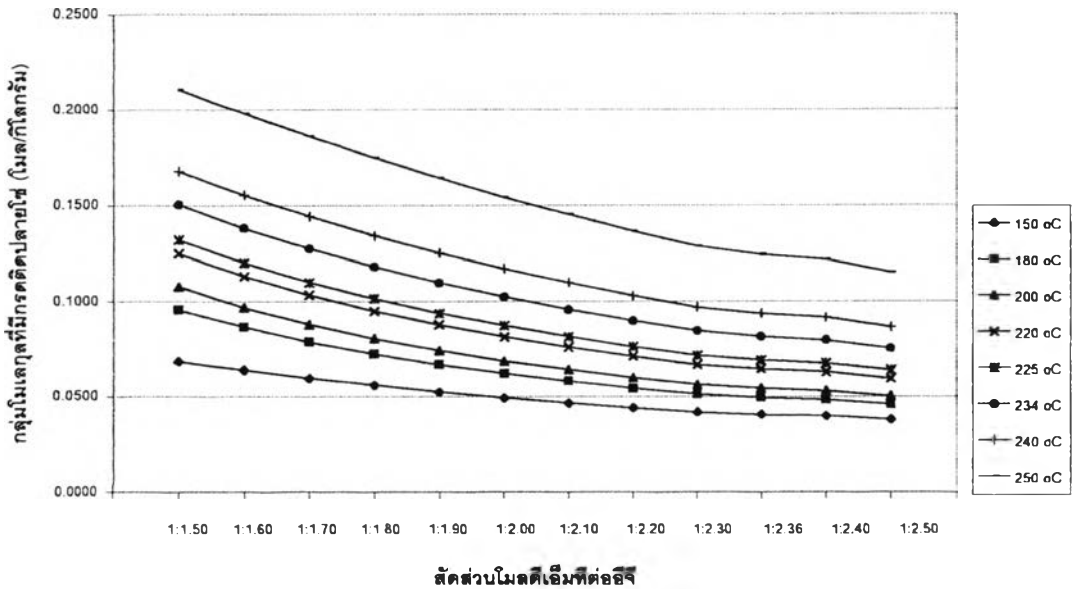
โดยในที่นี้จะทำการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีตั้งแต่ 1:1.50 ถึง 1:2.50 ผลการทดสอบแบบจำลองได้แสดงไว้ในตารางที่ ก-1 ถึง ก-8 (ในภาคผนวก ก.) จากนั้นเมื่อนำผลการทดสอบมาศึกษาความสัมพันธ์ระหว่าง ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที ความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ความเข้มข้นของดีอีจีและความเข้มข้นของน้ำ เมื่อเทียบกับการเปลี่ยนแปลงสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ซึ่งการนำเสนอจะแสดงในรูปกราฟที่ 5-1 ถึง 5-4 ดังต่อไปนี้



รูปที่ 5-1 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที กับสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

จากกราฟรูป 5-1 พบว่าการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีแปรผันโดยตรงตามสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีและอุณหภูมิ กล่าวคือที่อุณหภูมิ 150°C จะเกิดการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีน้อยที่สุดและจะมากขึ้นเรื่อย ๆ และพบว่าที่อุณหภูมิ 220 °C 225 °C 234 °C 240 °C และ 250°C การเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีจะใกล้เคียงกันมากจนไม่สามารถเห็นความแตกต่างได้ชัดเจน เมื่อพิจารณาถึงความสัมพันธ์ระหว่างสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีกับการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที ทำให้ทราบว่าที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีต่ำจะเกิดการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีเพียงเล็กน้อย และที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีสูงๆ จะเกิดการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีมาก ทั้งนี้สามารถอธิบายโดยอ้างถึงสมการปฏิกิริยาหลักของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน (สมการปฏิกิริยา 3-1 ถึง 3-3) กล่าวคือการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีคือการเพิ่มปริมาณอีจีที่มากเกินพอ ซึ่งการที่มีปริมาณอีจีที่มากเกินพอจะทำให้สมดุลของปฏิกิริยาขยับไปทางฝั่งขวาของสมการปฏิกิริยามากขึ้น จึงเป็นเหตุให้มีค่า การเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีมากขึ้น แต่อย่างไรก็ตามการใช้ปริมาณอีจีมากขึ้นเรื่อย ๆ จะไม่ทำให้ได้ค่า

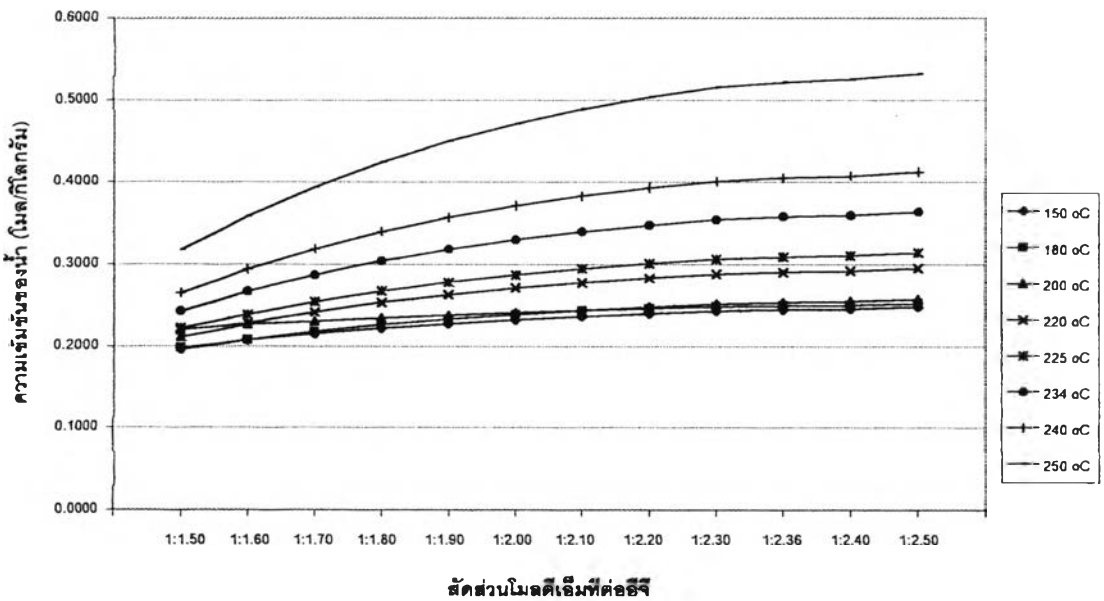
ร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีเพิ่มขึ้น ดังเห็นได้จากรูปที่ 5-1 ว่าที่สัดส่วนโมลดีเอ็มที ต่ออีจีตั้งแต่ 1 : 2.30 ขึ้นไปค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีมีการเปลี่ยนแปลงน้อยมาก ดังนั้นปริมาณอีจีที่มากเกินพอจะสามารถกำหนดไว้ที่ปริมาณหนึ่ง



รูปที่ 5-2 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดปลายโซ่กับสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

สำหรับกราฟรูป 5-2 เป็นการแสดงการเกิดกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ข้างเคียง พบว่าแปรผกผันกับการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี โดยปริมาณสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่อยู่ในช่วง 1 1.50 ถึง 1: 2.20 เท่านั้นที่เห็นการเปลี่ยนผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่อย่างชัดเจน ส่วนในช่วง 1: 2.20 ถึง 1: 2.50 กลับไม่เห็นการเปลี่ยนแปลงหรือเปลี่ยนแปลงน้อยมาก นั่นเป็นเพราะว่าการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีคือการเพิ่มปริมาณอีจี ซึ่งเหมือนกับการเพิ่มปริมาณกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่อัลกอฮอล์ติดที่ปลายโซ่ ด้วยเหตุนี้จึงทำให้กลุ่มโมเลกุลที่มี

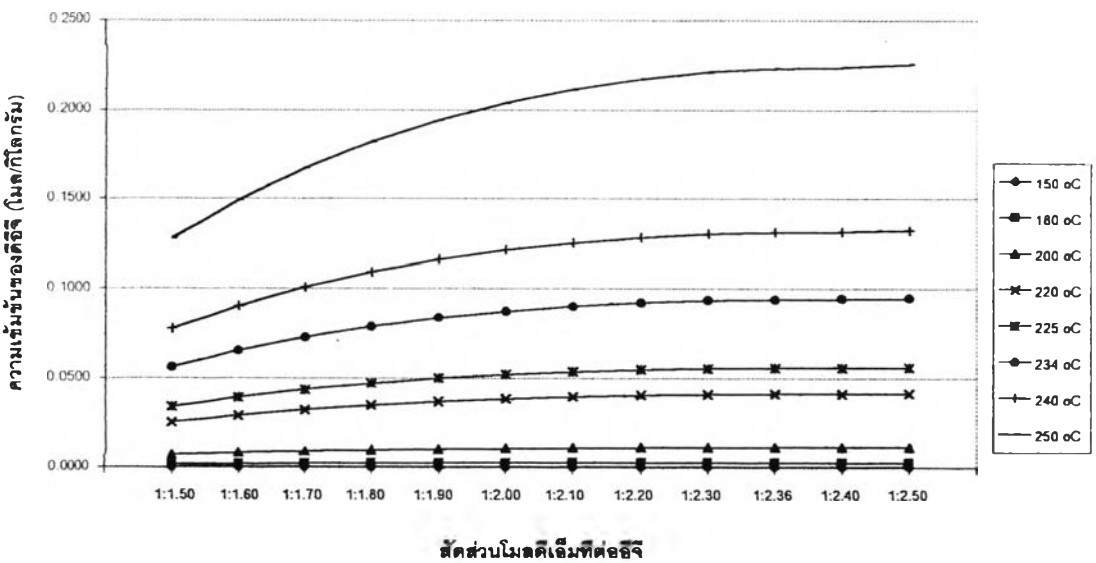
กรดติดที่ปลายโซ่ลดลงโดยน่าจะมีสาเหตุมาจากการทำปฏิกิริยากันระหว่างกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่อัลกอฮอล์ติดที่ปลายโซ่กับกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่กรดติดที่ปลายโซ่นั่นเอง จึงเป็นเหตุให้กลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ลดลงเมื่อเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี



รูปที่ 5-3 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของน้ำกับสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

ส่วนกราฟรูป 5-3 เป็นผลการเกิดน้ำซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ข้างเคียง โดยปริมาณน้ำที่เกิดขึ้นจะแปรผันโดยตรงกับการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีในช่วง 1 :1.50 ถึง 1:2.20 แต่แทบจะไม่พบความเปลี่ยนแปลงที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีในช่วง 1:2.20 ถึง 1:2.50เช่นกัน และที่น่าสนใจคือ พบว่ายิ่งอุณหภูมิยิ่งสูงยิ่งทำให้เห็นความแตกต่างชัดเจน ทั้งนี้สามารถอธิบายโดยอ้างถึงสมการปฏิกิริยาข้างเคียงของปฏิกิริยาทรานส์เอส

เตอร์ริฟิเคชัน (สมการปฏิกิริยา 3-7 ถึง 3-8) ที่สามารถชี้แจงได้ด้วยหลักการที่มีปริมาณอีจีที่มากเกินพอเหมือนกับที่ได้อธิบายถึงการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีที่กล่าวมาแล้วข้างต้น เพราะว่าจากสมการปฏิกิริยาของการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของน้ำจะเกิดพร้อมกับการเกิดผลิตภัณฑ์หลัก



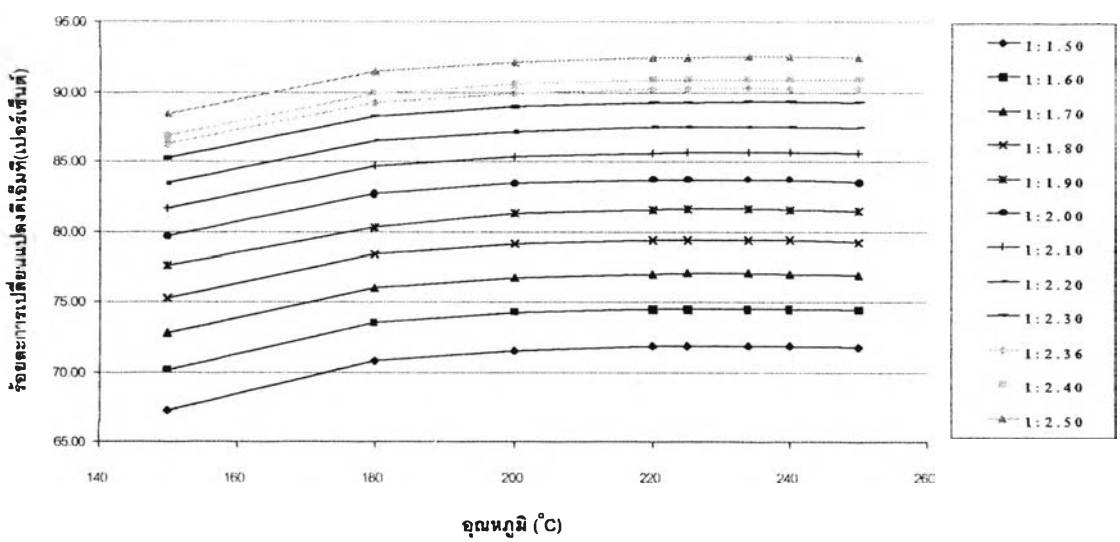
รูปที่ 5-4 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของดีอีจีกับสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

ในกราฟรูป 5-4 การเกิดดีอีจีซึ่งเป็นผลิตภัณฑ์ข้างเคียง จะเหมือนกับการเกิดน้ำ นั่นคือจะแปรผันโดยตรงกับการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีในช่วง 1:1.50 ถึง 1:2.20 และแทบจะไม่พบความเปลี่ยนแปลงที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีในช่วง 1:2.20 ถึง 1:2.50 เช่นกัน แต่เป็นที่น่าสังเกตว่าที่อุณหภูมิสูงจะพบเห็นความแตกต่างที่ชัดเจน

ซึ่งสามารถอธิบายด้วยสมการการเกิดปฏิกิริยาข้างเคียงของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน (สมการปฏิกิริยา 3-4 ถึง 3-6) ที่อธิบายในหลักการเดียวกับการเกิดน้ำ

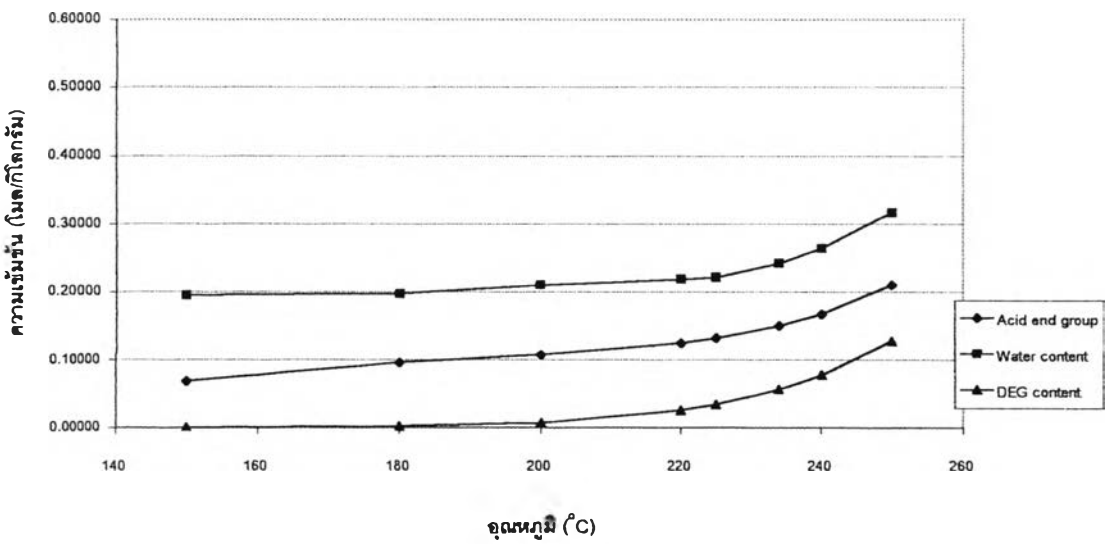
5.2 ผลการทดสอบแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีคงที่ที่ 1 : 1.50 – 1 : 2.50 โดยเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิตั้งแต่ 150°C ถึง 250°C

ดังจะเห็นได้จากผลการทดสอบในตาราง ก.1 ถึง ก.8 (ในภาคผนวก.ก) และนำผลการทดสอบมาศึกษาความสัมพันธ์ระหว่าง ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที ความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ความเข้มข้นของดีอีจีและความเข้มข้นของน้ำ เมื่อเทียบกับการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิ ซึ่งการนำเสนอจะแสดงในรูปกราฟที่ 5-5 ถึง 5-7 ดังต่อไปนี้



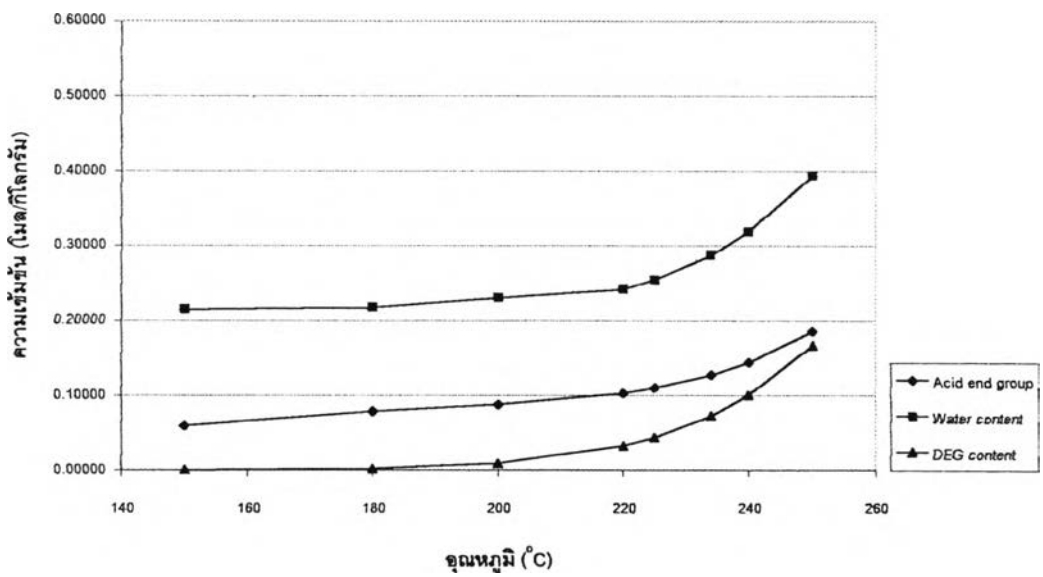
รูปที่ 5-5 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที กับอุณหภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีต่าง ๆ

จากกราฟรูปที่ 5-5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีกับอุณหภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีต่างๆ จะสังเกตเห็นว่าที่อุณหภูมิต่ำจะเกิดการเปลี่ยนแปลง ดีเอ็มทีน้อย แต่เมื่อเพิ่มอุณหภูมิสูงขึ้นปริมาณการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีจะเพิ่มขึ้นตามไปด้วย ในช่วงอุณหภูมิ 150 °C ถึง 220 °C ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีจะมีอัตราการเพิ่มขึ้นที่ชัดเจน แต่ในช่วงอุณหภูมิ 220 °C ถึง 250 °C มีอัตราการเพิ่มค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีน้อยมาก ทั้งนี้สามารถอธิบายโดยอ้างอิงถึงปฏิกิริยาหลักของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน (สมการปฏิกิริยา 3-1 ถึง 3-3) เช่นกัน กล่าวคือการเพิ่มอุณหภูมิเป็นการเพิ่มค่าคงที่ของปฏิกิริยาที่จะทำให้สมดุลของปฏิกิริยาขยับไปทางขวาของสมการปฏิกิริยามากขึ้น แต่เมื่อเพิ่มไปถึงที่ระดับหนึ่งจะทำให้สมดุลของปฏิกิริยาคงที่ซึ่งเป็นเหตุให้ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีมีการเปลี่ยนแปลงน้อยจนถึงขั้นไม่เปลี่ยนแปลง



รูปที่ 5-6 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดคติดที่ปลายโซ่ น้ำ และดีอีจี กับอุณภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่ 1:1.50

ส่วนกราฟรูปที่ 5-6 แสดงการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ดีอีจีและน้ำ กับอุณภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่ 1:1.50 พบว่าการเปลี่ยนแปลงของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ดีอีจี และน้ำจะมีการเปลี่ยนปลงในลักษณะเดียวกันกล่าวคือมีการเปลี่ยนแปลงน้อยช่วงอุณหภูมิ 150 °C ถึง 220°C และจะเห็นการเปลี่ยนแปลงมากขึ้นช่วงอุณหภูมิ 220 °C ถึง 250 °C ที่สามารถอธิบายโดยอ้างอิงถึงปฏิกิริยาข้างเคียงของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน (สมการปฏิกิริยา 3-4 ถึง 3-8) เช่นกัน นั่นก็คือการเพิ่มอุณหภูมิเป็นการเพิ่มค่าคงที่ของปฏิกิริยาที่จะทำให้สมดุลของปฏิกิริยาขยับไปทางขวาของสมการปฏิกิริยามากขึ้น เป็นที่น่าสังเกตว่าการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงมีการเปลี่ยนแปลงมากที่อุณหภูมิในช่วง 220 °C ถึง 250 °C ซึ่งที่อุณหภูมิดังกล่าวสูงกว่าจุดเดือดของอีจี (197°C)



รูปที่ 5-7 กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ น้ำ และดีอีจี กับอุณภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่ 1:1.70

ส่วนกราฟรูปที่ 5-7 เป็นการแแสดงอิทธิพลของอุณหภูมิที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีเป็น 1: 1.70 ต่อการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ดีอีจีและน้ำ พบว่าการเปลี่ยนแปลงของ กลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ดีอีจี และน้ำจะมีการเปลี่ยนแปลงในลักษณะเดียวกันกล่าวคือมีการเปลี่ยนแปลงน้อยช่วงอุณหภูมิ 150°C ถึง 220°Cและจะเห็นการเปลี่ยนแปลงมากขึ้นในช่วงอุณหภูมิ 220 °C ถึง 250 °C และเป็นที่น่าสังเกตว่าการเปลี่ยนแปลงของน้ำและดีอีจีเท่านั้นที่เพิ่มขึ้นมากที่อุณหภูมิในช่วง 220 °C ถึง 250 °C ในขณะที่การเพิ่มขึ้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ไม่ได้เพิ่มขึ้นมากเหมือนกับการเพิ่มขึ้นของน้ำและดีอีจี ทั้งนี้เนื่องมาจากการเพิ่มขึ้นของสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่ได้อธิบายไว้ข้างต้นแล้วนั่นเอง กล่าวคือการเพิ่มสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีจะเป็นสาเหตุให้มีการเพิ่มของกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่อัลกอฮอล์ติดที่ปลายโซ่ ด้วยเหตุนี้จึงทำให้กลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ลดลงโดยน่าจะมีสาเหตุมาจากการทำปฏิกิริยากันระหว่างกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่อัลกอฮอล์ติดที่ปลายโซ่กับกลุ่มโมเลกุลที่มีหมู่กรดติดที่ปลายโซ่นั่นเอง จึงเป็นเหตุให้กลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ไม่ได้เพิ่มขึ้นมากเหมือนน้ำและดีอีจี ดังจะเห็นแนวโน้มของการเปลี่ยนแปลงการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ดีอีจีและน้ำได้อย่างชัดเจนที่สอดคล้องกับคำอธิบายข้างต้นดังกราฟรูปที่ ก-1 ถึง ก-9 (ภาคผนวก ก) ที่สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีในช่วง 1: 1.80 ถึง 1: 2.50

เมื่อนำผลการทดสอบข้างต้นมาเปรียบเทียบกับข้อมูลจริงในโรงงานอุตสาหกรรม โดยการศึกษาการเปรียบเทียบค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีและการเกิดผลิตภัณฑ์จากปฏิกิริยาข้างเคียงดังต่อไปนี้

5.3 ศึกษาการเปรียบเทียบค่าการเปลี่ยนแปลง ดีเอ็มที และการเกิดผลิตภัณฑ์จากปฏิกิริยาข้างเคียงที่ได้จากการทดสอบ กับค่าที่วัดได้จริง

ตาราง 5-1 แสดงผลการศึกษาค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที โดยการเปรียบเทียบข้อมูลที่ได้จากการทดสอบกับข้อมูลจริงที่วัดได้จริง โดยใช้สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีเท่ากับ1 ต่อ 2.36

	ข้อมูลทดสอบ	ข้อมูลจริง
ค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที (เปอร์เซ็นต์)	90.27	98.73
เปอร์เซ็นต์ถูกต้อง (เปอร์เซ็นต์)	91.43	

ตาราง 5-2 แสดงผลการศึกษาการเกิดผลิตภัณฑ์จากปฏิกิริยาข้างเคียง โดยเปรียบเทียบข้อมูลที่ได้จากการทดสอบกับข้อมูลที่วัดได้จริง โดยใช้สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีเท่ากับ1 ต่อ 2.36

	ข้อมูลทดสอบ	ข้อมูลจริง
ความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดปลายโซ่ (โมล/กิโลกรัม)	0.127	0.018
ความเข้มข้นของน้ำ (โมล/กิโลกรัม)	0.358	0.005
ความเข้มข้นของดีอีจี (โมล/กิโลกรัม)	0.094	0.094

อนึ่งค่าข้อมูลจริงที่ได้จากโรงงานอุตสาหกรรมที่แสดงในตาราง 5-1 และ 5-2 ข้างต้นนั้นได้มาจากการวิเคราะห์ข้อมูลด้วยวิธีตามรายละเอียดในภาคผนวก ข และจากข้อมูลทั้งหมดดังกล่าวข้างต้นจะเห็นว่าสามารถสรุปให้เห็นความสอดคล้องของแบบจำลองกับความเป็นจริงดังนี้

1. จากการศึกษาค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที เปรียบเทียบข้อมูลทดสอบกับข้อมูลจริงดังตารางที่ 5-1 พบว่ามีความถูกต้องประมาณ 91 เปอร์เซ็นต์และแนวโน้มของการเปลี่ยนแปลงถูกต้องตามทฤษฎี และข้อมูลอ้างอิงกล่าวคือร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มทีจะแปรผันตรงกับอุณหภูมิ

2. จากการศึกษาการเกิดผลิตภัณฑ์ข้างเคียงเปรียบเทียบข้อมูลทดสอบกับข้อมูลจริงดังตารางที่ 5-2 พบว่าค่าความเข้มข้นของดีอีจีมีความใกล้เคียงกันมาก ส่วนค่าความเข้มข้นของน้ำและของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่มีความแตกต่างกันค่อนข้างมาก

3. จากข้อมูลดังกล่าวข้างต้นสามารถนำแบบจำลองทางคณิตศาสตร์มาหาเงื่อนไขที่เหมาะสมในการผลิตจริงโดยการหาค่าความผิดพลาดยกกำลังสอง (Least Square Test) โดยการนำค่าที่ทดสอบได้คือค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที ค่าความเข้มข้นของกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดติดที่ปลายโซ่ ค่าความเข้มข้นของดีอีจีและน้ำมาเปรียบเทียบกับค่าจริงที่ได้จากโรงงานอุตสาหกรรม โดยการหาค่าความผิดพลาดยกกำลังสองที่แต่ละอุณหภูมิและแต่ละสัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจี ซึ่งค่าความผิดพลาดยกกำลังสองที่ทดสอบได้จะแสดงในตาราง ก-12 (ภาคผนวก ก) และจากค่าความผิดพลาดยกกำลังสองที่ทดสอบได้สามารถสรุปหาสภาวะที่เหมาะสมในการผลิตจริงจากค่าความผิดพลาดยกกำลังสองที่น้อยที่สุดได้คือ

3.1 อุณหภูมิในการทำปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชั่นคือ 225°C

3.2 สัดส่วนโมลดีเอ็มทีต่ออีจีที่เหมาะสมคือ 1:2.30 ถึง 1:2.50