บทที่ 4
ผลการวิเคราะห์ข้อมูล

4.1 การวิเคราะห์ข้อมูลและการหาสมการทางคณิตศาสตร์ของแบบจำลอง

ในหัวข้อนี้ จะกล่าวถึงการวิเคราะห์ข้อมูลโดยการแทนค่าตัวแปรที่เก็บข้อมูลได้จากกระบวนการผลิตลงในสมการจลศาสตร์ แล้วหาความคลาดเคลื่อนของสมการจลศาสตร์ว่าขึ้นกับตัวแปรใดบ้าง จากนั้นจึงหาสมการของความคลาดเคลื่อน และหาสมการของแบบจำลองใหม่

จากข้อมูลของหน่วยกำจัดกำมะถันที่ได้พบว่า ระดับการเปลี่ยนแปลงของปริมาณกำมันในสารป้อนและผลิตภัณฑ์มีค่าสูงกว่า 90 เปอร์เซ็นต์ ดังนั้นจะใช้สมการจลศาสตร์สำหรับ Trickel Flow Reaction ในกรณีที่การเปลี่ยนแปลงของปริมาณกำมะถันในสารป้อนและผลิตภัณฑ์มีค่าสูงกว่า 90 เปอร์เซ็นต์มาศึกษา ดังที่กล่าวไว้ในหัวข้อ 2.3.2.2

$$\frac{1}{n-1}\left[\frac{1}{Sp^{n-1}} - \frac{1}{Sf^{n-1}}\right] = \frac{F * M * P}{WHSV} k_o .Exp(-Ea/RT)$$

.....สมการ 2.3.5)

ข้อมูลจากหน่วยกำจัดกำมะถันที่ได้จะถูกนำมาแทนในสมการข้างต้น เนื่องจากเมื่อเวลาผ่านไป ค่า k ของปฏิกิริยาจะเปลี่ยนไปตามสภาวะการผลิต ดังนั้นเมื่อนำข้อมูลจากหน่วยกำจัดกำมะถันมาแทนค่าทั้งสองฝั่งของสมการ ผลลัพธ์ที่ได้ทั้งสองฝั่งจะไม่เท่ากัน จากนั้นจะหาว่าผลลัพธ์ที่ได้จากสมการทั้งสองฝั่งมีความคลาดเคลื่อนต่างกันเท่าไร และความคลาดเคลื่อนนี้ขึ้นกับตัวแปรอะไรบ้าง

เมื่อได้ค่าความคลาดเคลื่อนของสมการทั้งสองฝั่งแล้ว จะทำการหาสมการของความคลาดเคลื่อนนั้น และเปลี่ยนให้สมการของความคลาดเคลื่อนเป็นตัวแปรแก้ไขที่เพิ่มเข้าไปในสมการจลศาสตร์ข้างต้น

สมการของตัวแปรแก้ไขที่ได้ จะถูกนำไปเพิ่มในฝั่งขวาของสมการจลศาสตร์ข้างต้น ซึ่งจะเปรียบเสมือนการหาค่า k ของปฏิกิริยาใหม่นั่นเอง

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ตัวอย่างค่าตัวแปรของกระบวนการผลิตที่นำไปแทนค่าในสมการ 2.3.5) ข้างต้น

n = 1.5 เนื่องจากปริมาณกำมะถันในผลิตภัณฑ์อยู่ในช่วง 500 ppm

Sp = 0.030 % wt หรือ 300 ส่วนในล้านส่วน ตามข้อมูลที่ได้จากกระบวนการผลิตในตารางที่ 3.1

Sf = 0.366 % wt ตามข้อมูลที่ได้จากกระบวนการผลิต

WHSV = 3.01 ton/m^3 hr ตามข้อมูลที่ได้จากกระบวนการผลิต

F= 1 เนื่องจากสารป้อนเป็นน้ำมันที่ได้จากการกลั่นตรง ตามตารางที่ 2.2

M = 3.43 คำนวณได้จาก ช่วงอุณหภูมิของจุดเดือดของสารป้อนที่ได้จากการเก็บข้อมูลของหน่วยผลิต โดยที่ค่าจุดเดือดของการกลั่น ASTM10% มีค่า 203 องศาเซลเซียส ASTM30% มีค่า 225 องศาเซลเซียส ASTM50% มีค่า 245 องศาเซลเซียส ASTM70% มีค่า 265 องศาเซลเซียส และ ASTM90% มีค่า 286 องศาเซลเซียส

P = 7.25 บาร์ คำนวณได้จากรากที่สองของความดันย่อยของไฮโดรเจนที่เก็บข้อมูลได้จากกระบวนการผลิต

k_0 = 5e8 เป็นค่าที่ได้จากตารางที่ 2.2

Ea = 25000 kcal/kmol ได้จากตารางที่ 2.2

R= 1.987 kcal/kmol/K

T= 622.5 K เป็นค่าที่ได้จากการเก็บข้อมูลของหน่วยผลิต

เมื่อนำค่าต่าง ๆ เหล่านี้ไปแทนในสมการจลศาสตร์ข้างต้น พบว่าทางฝั่งซ้ายของสมการจะได้ค่าเท่ากับ 8.284 ในขณะฝั่งขวาของสมการจะมีค่าเท่ากับ 6.877 อัตราส่วนที่แตกต่างกันระหว่างสมการฝั่งซ้ายต่อสมการฝั่งขวาเท่ากับ 1.205

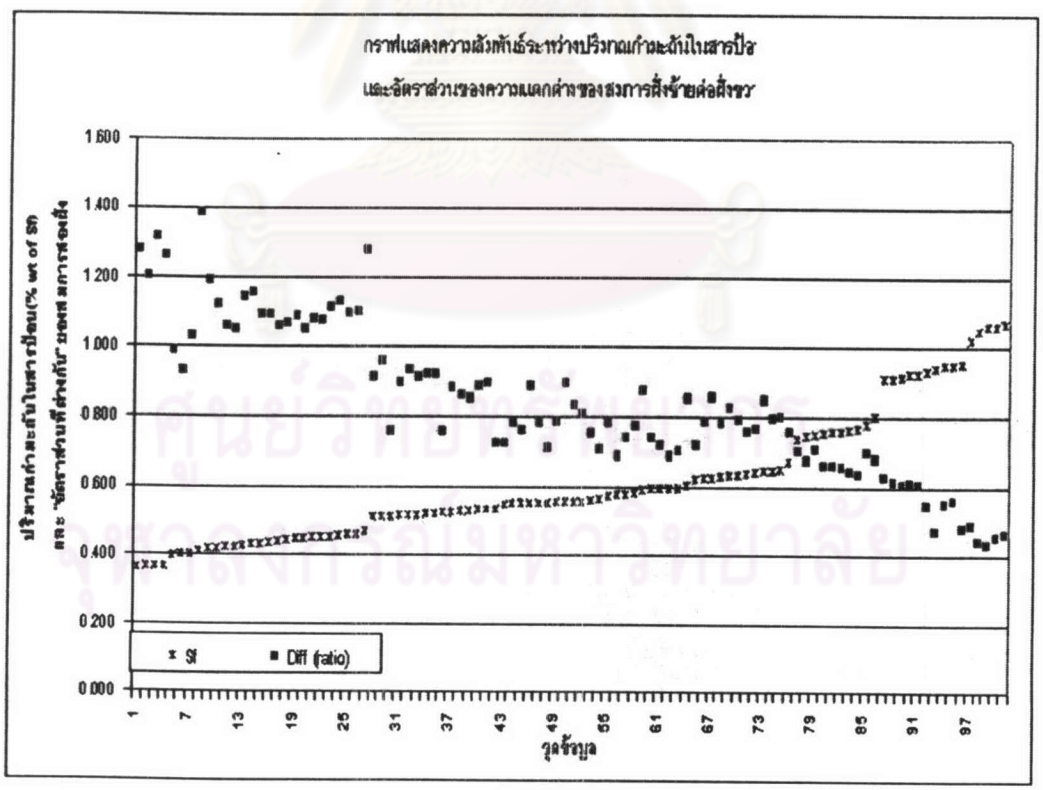
ภาคผนวก ข แสดงผลลัพธ์ของสมการฝั่งซ้าย ฝั่งขวา และ "อัตราส่วนที่แตกต่างกันจากการแทนค่าที่เก็บข้อมูลได้จากกระบวนการผลิต

จากการวิเคราะห์ข้อมูลพบว่า "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันระหว่างสมการฝั่งซ้ายต่อสมการฝั่งขวาขึ้นอยู่กับ

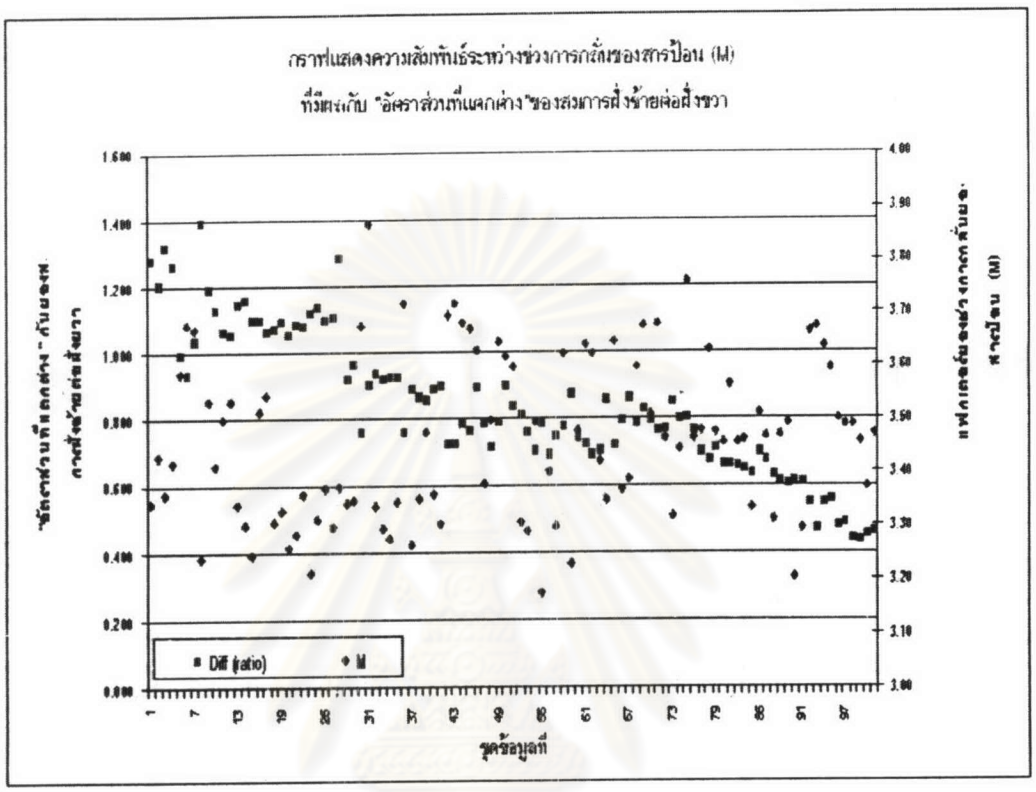
1) ปริมาณกำมะถันในสารป้อน เมื่อสารป้อนมีปริมาณกำมะถันสูงขึ้น "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันระหว่างสมการฝั่งซ้ายต่อสมการฝั่งขวาจะลดลง ดังแสดงในรูปที่ 4.1 จากข้อมูลนี้แสดงให้เห็นว่าปริมาณกำมะถันในสารป้อนมีผลกับความคลาดเคลื่อนของสมการจลศาสตร์มาก

2) ช่วงอุณหภูมิการกลั่นของสารป้อน จากรูปที่ 4.2 ซึ่งแสดงผลของช่วงการกลั่นของสารป้อนที่มีผลกับ "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันระหว่างสมการฝั่งซ้ายต่อสมการฝั่งขวา ซึ่งจากกราฟพบว่าช่วงอุณหภูมิของการกลั่นมีผลกับความคลาดเคลื่อนของสมการจลศาสตร์ แต่เนื่องจากกราฟที่ได้มีค่ากระจายมาก ทำให้ไม่สามารถวิแคราะห์ได้ว่าช่วงการกลั่นของสารป้อนมีผลต่อความคลาดเคลื่อนในทิศทางใด อีกสาเหตุหนึ่งคืออิทธิพลของปริมาณกำมะถันที่อยู่ในสารป้อนมีผลกับความคลาดเคลื่อนนี้มากกว่าช่วงจุดเดือดของสารป้อน

รูปที่ 4.1 ผลของปริมาณกำมะถันในสารป้อนที่มีต่อ "อัตราส่วนที่แตกต่าง"กันของสมการทั้งสองฝั่ง



รูปที่ 4.2 ผลของช่วงการกลั่นของสารป้อนที่มีผลกับ "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันระหว่างสมการฝั่งซ้ายต่อสมการฝั่งขวา



เมื่อนำค่า "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันของสมการทั้งสองฝั่งไปหาความสัมพันธ์ทางคณิตศาสตร์โดยให้ความสัมพันธ์ของ "อัตราส่วนที่แตกต่าง" กันหรือความคลาดเคลื่อนนี้เป็นสมการเส้นตรง จะได้สมการคณิตศาสตร์ของ "อัตราส่วนที่แตกต่างกัน" หรือความคลาดเคลื่อนที่เป็นฟังก์ชันของ ปริมาณกำมะถันในสารป้อน แฟกเตอร์ของช่วงการกลั่นของสารป้อน และระยะเวลาของการใช้งานของตัวเร่งปฏิกิริยา ดังสมการข้างล่างนี้

"อัตราส่วนที่แตกต่าง" ของสมการฝั่งซ้ายต่อฝั่งขวา = - 0.9343525*Sf - 0.3276005*M -0.0009067*date + 36.984932 .....สมการ 4.1.1)

Sf คือ ปริมาณกำมะถันในสารป้อน (%wt)

M คือ แฟกเตอร์ของช่วงของการกลั่นของสารป้อน

Date คือ จำนวนวันที่ตัวเร่งปฏิกิริยาผ่านการใช้งานมา นับตั้งแต่บรรจุตัวเร่งปฏิกิริยาลงในเครื่องปฏิกรณ์

สมการคณิตศาสตร์นี้หาได้จากฟังก์ชั่น Linear Regression ของโปรแกรม Excel สมการที่ได้นี้มีค่า R2 เท่ากับ 0.82 ซึ่งเป็นค่าที่เข้าใกล้ 1 มาก จึงพิจารณาได้ว่าสมการที่ได้เป็นสมการเส้นตรงที่มีความน่าเชื่อถือได้

เมื่อได้สมการของความคลาดเคลื่อนแล้ว จะได้สมการของตัวแปรแก้ไขด้วย โดยสมการของตัวแปรแก้ไขจะเป็นสมการเดียวกับสมการความคลาดเคลื่อนดังนี้

Correction Factor (Cf) = - 0.9343525* Sf - 0.3276005* M -0.0009067* date + 36.984932

.....สมการ 4.1.2)

เมื่อ Cf คือตัวแปรแก้ไขที่สามารถนำไปเพิ่มให้กับสมการจลศาสตร์ทางด้านฝั่งขวาได้

เมื่อแทนสมการ 4.1.2) ลงในสมการ 2.3.5) จะได้สมการใหม่ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาณกำมะถันในสารป้อน ปริมาณกำมะถันในสารผลิตภัณฑ์ อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ และตัวแปรแก้ไขที่ได้จากข้อมูลของหน่วยกำจัดกำมะถันที่ศึกษา ดังนี้

$$\frac{1}{n-1}\left[\frac{1}{Sp^{n-1}} - \frac{1}{Sf^{n-1}}\right] = \frac{F * M * P * Cf}{WHSV} k_o .Exp(-Ea/RT)$$

.....สมการ 4.1.3)

เมื่อย้ายข้างสมการที่ 4.1.3) เพื่อคำนวณหาอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ จะได้สมการดังนี้

$$T = (-Ea/R)\ \ln\left[\frac{1}{n-1}\left[\frac{1}{Sp^{n-1}} - \frac{1}{Sf^{n-1}}\right]\right] * \frac{WHSV}{k_o * F * M * P * Cf}$$

.....สมการ 4.1.4)

เช่นเดียวกัน เมื่อย้ายข้างสมการ 4.1.3) เพื่อหาค่าปริมาณกำมะถันในสารผลิตภัณฑ์ จะได้สมการดังนี้

$$\frac{1}{Sp^{n-1}} = \left[\frac{F * M * P * Cf}{WHSV} k_o .Exp(-Ea/RT)\right](n-1) + \frac{1}{Sf^{n-1}}$$

.....สมการ 4.1.5)

4.2 ผลการเปรียบเทียบแบบจำลองที่หาได้กับข้อมูลจริงของหน่วยกำจัดกำมะถัน

สมการของตัวแปรแก้ไขที่ได้ เป็นสมการที่ขึ้นอยู่กับปริมาณกำมะถันในสารป้อน ช่วงจุดเดือดของสารป้อนและระยะเวลาการใช้งานของตัวเร่งปฏิกิริยา เมื่อนำตัวแปรแก้ไขไปใส่ในสมการฝั่งขวาแล้วจะได้สมการใหม่ ดังที่กล่าวแล้วใน 4.1) ผลการคำนวณสมการใหม่หลังจากใส่ตัวแปรแก้ไขแล้วแสดงใน ภาคผนวก ข

สมการของตัวแปรแก้ไขที่ได้สอดคล้องกับทฤษฎีทางจลศาสตร์ เนื่องจากค่า k_o จะเปลี่ยนไปตามความเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยา ซึ่งความเสื่อมของตัวเร่งปฏิกิริยาจะมากหรือน้อยนั้นขึ้นอยู่กับปริมาณกำมะถันในสารป้อน ระยะเวลาการใช้งานของตัวเร่งปฏิกิริยา เป็นต้น

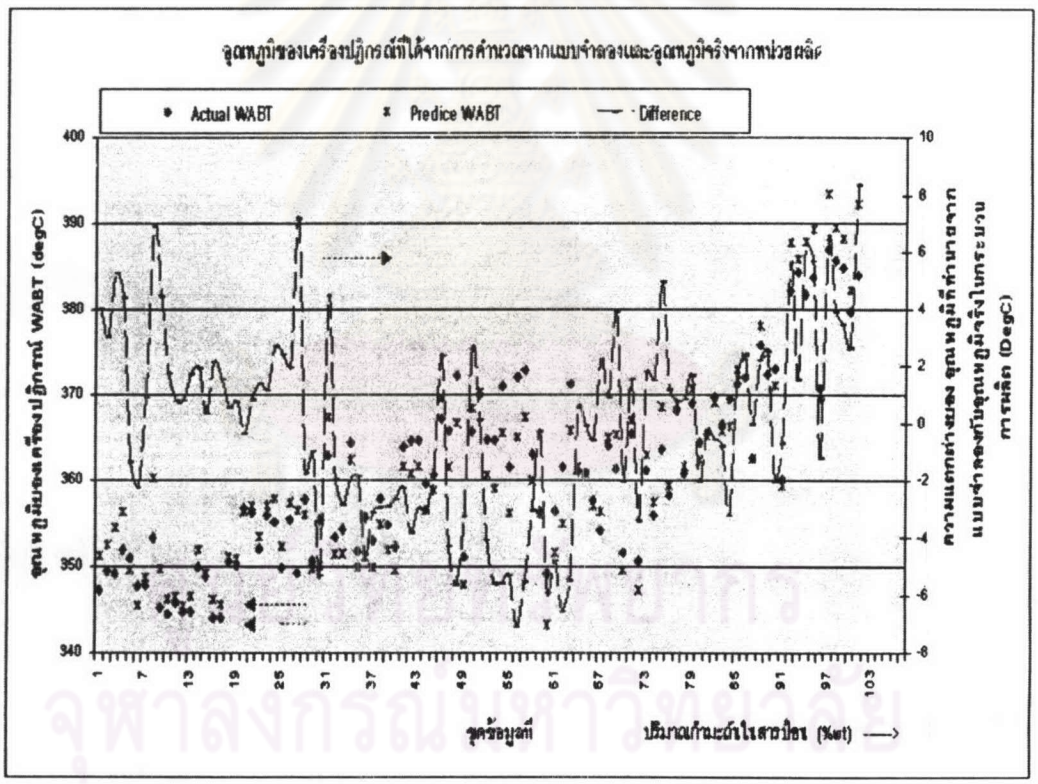
ค่าตัวแปรแก้ไขที่คำนวณได้จากข้อมูลที่เก็บจากหน่วยผลิตมีค่าอยู่ในช่วง +/- 20 เปอร์เซ็นต์ ซึ่งอาจพิจารณาได้ว่าค่าความคลาดเคลื่อนระหว่างสมการจลศาสตร์กับข้อมูลจากหน่วยผลิตจริงยังไม่มากนัก แสดงได้ว่าประสิทธิภาพของตัวเร่งปฏิกิริยายังอยู่ในสภาพที่ดี

เมื่อได้สมการจลศาสตร์สมการใหม่จากข้อมูลการทดลองแล้ว เราได้นำเอาสมการใหม่นี้ มาคำนวณเพื่อทำนายค่าอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ต้องการเมื่อทราบคุณสมบัติของ

สารป้อน และทำนายค่าปริมาณกำมะถันในสารผลิตภัณฑ์เมื่อทราบตัวแปรในกระบวนการผลิต จากนั้น ทำการเปรียบเทียบค่าอุณหภูมิที่ทำนายได้จากสมการคณิตศาสตร์สมการใหม่กับอุณหภูมิจริงที่ได้จากข้อมูลของหน่วยผลิต ผลการเปรียบเทียบแสดงในรูป 4.3 ถึง 4.5 และสามารถสรุปได้ดังนี้

1) ความแตกต่างของอุณหภูมิที่ได้จากการทำนายและอุณหภูมิจริงที่ใช้ในหน่วยผลิตอยู่ในช่วงค่าเฉลี่ย +/- 3 องศาเซลเซียส โดยที่ความแตกต่างสูงสุดของอุณหภูมิที่ได้จากการทำนายและอุณหภูมิจริงที่ใช้ในหน่วยผลิตอยู่ในช่วง +/- 6 องศาเซลเซียส ดังแสดงในรูปที่ 4.3 และ 4.4

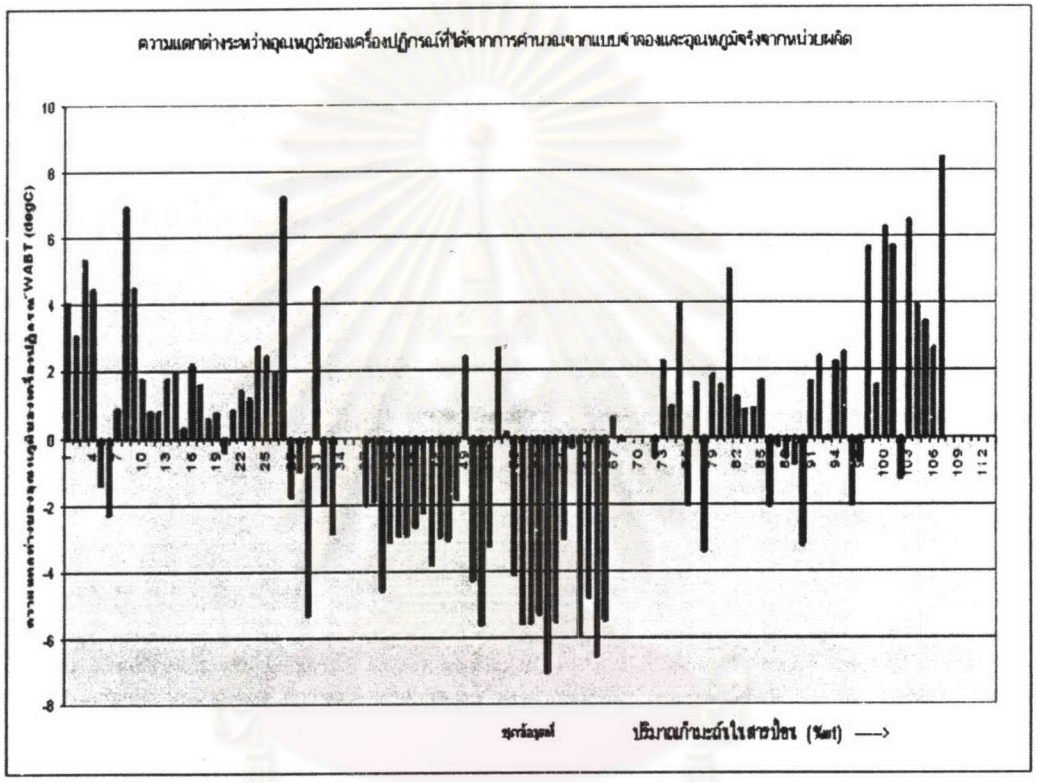
รูปที่ 4.3 อุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่ทำนายได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ เทียบกับที่ได้จากข้อมูลของกระบวนการผลิต



ความแตกต่างของอุณหภูมิที่ได้จากการทำนาย และอุณหภูมิจริงที่ใช้ในหน่วยผลิตอยู่ในช่วงที่ยอมรับได้ เมื่อพิจารณาว่าค่าความผิดพลาดของเครื่องมือวัด ซึ่งก็คือ

Thermocouple อยู่ในช่วง +/- 1 เปอร์เซ็นต์ ซึ่งพบว่าอุณหภูมิที่วัดได้จากเครื่องมือวัดอาจมีความแตกต่างได้ถึง 3-4 องศาเซลเซียส เนื่องจากอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์อยู่ในช่วง 340 ถึง 380 องศาเซลเซียส

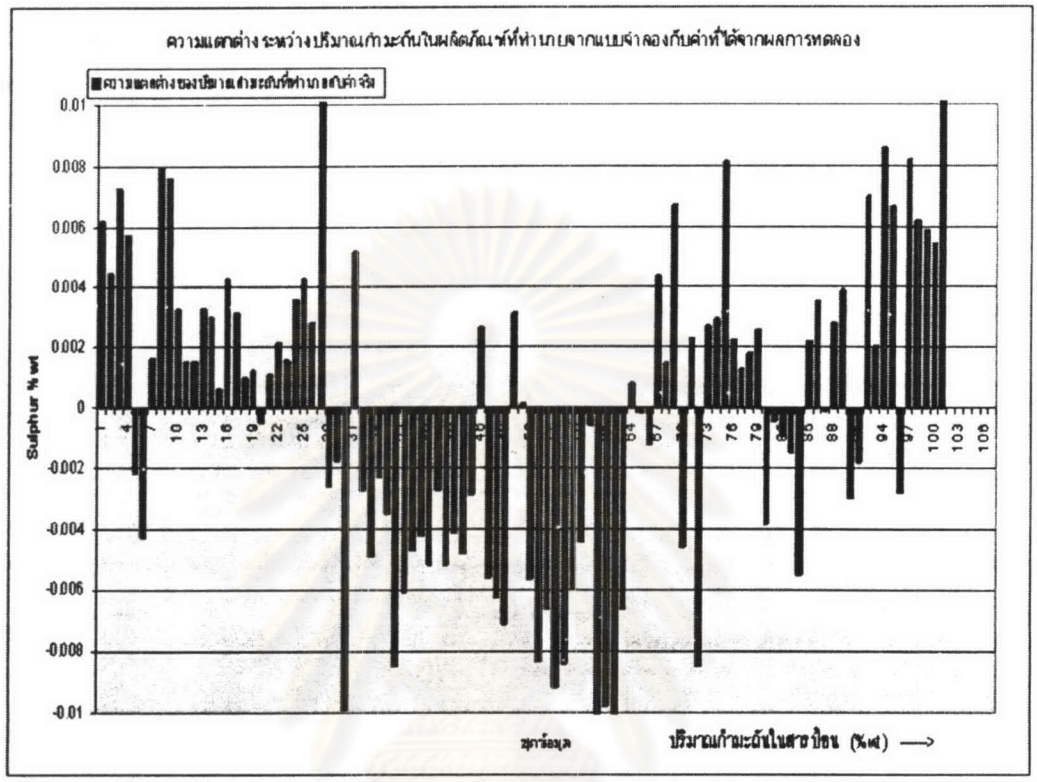
รูปที่ 4.4 ความแตกต่างของอุณหภูมิของเครื่องปฏิกรณ์ที่คำนวณได้จากสมการแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่หาได้กับอุณหภูมิที่ได้จากข้อมูลของหน่วยผลิต



2) ความแตกต่างของปริมาณกำมะถันที่ได้จากการทำนายและปริมาณกำมะถันจริงที่วัดได้จากสารผลิตภัณฑ์อยู่ในช่วงค่าเฉลี่ย +/- 0.004 เปอร์เซ็นโดยน้ำหนัก โดยที่ความแตกต่างสูงสุดของปริมาณกำมะถันในสารผลิตภัณฑ์อยู่ที่ประมาณ 0.01 เปอร์เซ็นโดยน้ำหนัก ดังแสดงในรูปที่ 4.5

เมื่อพิจารณา Repeatability ของการวัดปริมาณกำมะถันในน้ำมัน พบว่าค่า Repeatability อยู่ในช่วง +/- 0.006 เปอร์เซ็นต์โดยน้ำหนัก ดังนั้นความแตกต่างของปริมาณกำมะถันที่ทำนายได้กับค่าจริงที่วัดได้จึงอยู่ในช่วงที่ยอมรับได้

รูปที่ 4.5 ความแตกต่างของปริมาณกำมะถันในผลิตภัณฑ์ที่ทำนายได้กับปริมาณจริงที่ได้จากการข้อมูลของกระบวนการผลิต



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย