184543

วิทยานิพนธ์นี้ได้เปรียบเทียบการวิเคราะห์การถดถอยและการวิเคราะห์โมเมนต์ ในการประมาณค่าพารามิเตอร์การถ่ายโอนและจลนพลศาสตร์จากผลการทดลองแทป โดยใช้โค้งตอบสนองสองประเภท คือ อัตราการไหลขาออกและโค้งตอบสนองนอร์มัลไลซ์ โค้งอัตราการไหลขาออกของก๊าซจากการทดลองได้จากการจำลองแบบที่สมมติให้อัตราการไหลขาเข้าไม่เป็นฟังก์ชันเดลตา การประมาณค่าพารามิเตอร์ใช้แบบจำลองที่สมมติว่าอัตราการไหลขาเข้าเป็นฟังก์ชันเดลตา การเปรียบเทียบอยู่บนพื้นฐานของร้อยละความแตกต่างของตัวแปรที่ประมาณได้และตัวแปรจริง ร้อยละความแตกต่างนี้ยังสามารถบ่งชี้การใช้งานได้ของฟังก์ชันเดลตาด้วย ในกรณีของการแพร่ พารามิเตอร์ที่ใช้คือ สัมประสิทธิ์การแพร่ของก๊าซ ในกรณีของปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่งพารามิเตอร์คือ ค่าคงที่อัตราเร็วปฏิกิริยา ผลการคำนวณแสดงว่ากรณีการแพร่ ร้อยละความแตกต่างของค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ จากการวิเคราะห์การถดถอยมีค่าเป็นสองเท่าของค่าที่ได้จากการวิเคราะห์โมเมนต์ กรณีปฏิกิริยาไม่ผันกลับอันดับหนึ่ง ร้อยละความแตกต่างของค่าคงที่อัตราเร็วปฏิกิริยาอาจมีค่าสูงมากขึ้นกับวิธีการประมาณค่าพารามิเตอร์ ชนิดของโค้งตอบสนอง และค่าการแปลงผัน

184543

Regression analysis and moment analysis for estimation of transport and kinetic parameters in TAP experiments are compared using different types of responses including exit flow rate curves and normalized responses. The experimental responses were obtained from simulation under a non-ideal inlet flow condition. The parameter estimation was performed using the ideal model. The quantities used in the comparison are the percentage differences between the estimated and the real parameters including the diffusivity and the irreversible first order reaction rate constant. These quantities also indicate the validity of the ideal inlet condition. For typical domains in TAP experiments, the diffusivity percentage difference obtained from the regression analysis was found to be about two times larger than that from the moment analyses. The percentage difference of the reaction rate constant can be large and depends on the estimation methods, the types of the response, and the gas conversion.