

## บทที่ 4

### ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

ในบทนี้กล่าวถึงขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย ประกอบด้วย อุปกรณ์ และสารเคมี การเตรียมและศึกษาองค์ประกอบกรดเสีย Pickling Liquors ขั้นตอนการทดลองกระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน ขั้นตอนการทดลองข่างานนิรวัลสำหรับการสร้างแบบจำลอง โดยมีรายละเอียดดังนี้

#### 4.1 อุปกรณ์ และสารเคมี

ณ ห้องปฏิบัติการ ภาควิชาวิศวกรรมเคมี จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

1. ชุดเครื่องแก้วสำหรับทดลอง
2. กระบวนการกำจัดสนิมจำลอง
3. กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออนแบบฟิกเบด 2 หอ
4. เรซินแลกเปลี่ยนไอออนประจุบวก Purolite C-150
5. เรซินแลกเปลี่ยนไอออนประจุลบ Purolite A-500
6. กรดไฮโดรคลอริก
7. ไฮโดรเจนเปอร์ออกไซด์

หน่วยงานภายนอก ณ ศูนย์เครื่องมือวิจัยวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

1. เครื่องวิเคราะห์ไอออนเหล็ก (Atomic Absorption Spectrometer)  
Varian Spectr Model AA-300

#### 4.2 การศึกษาองค์ประกอบ และการเตรียมกรดเสีย (Pickling liquors)

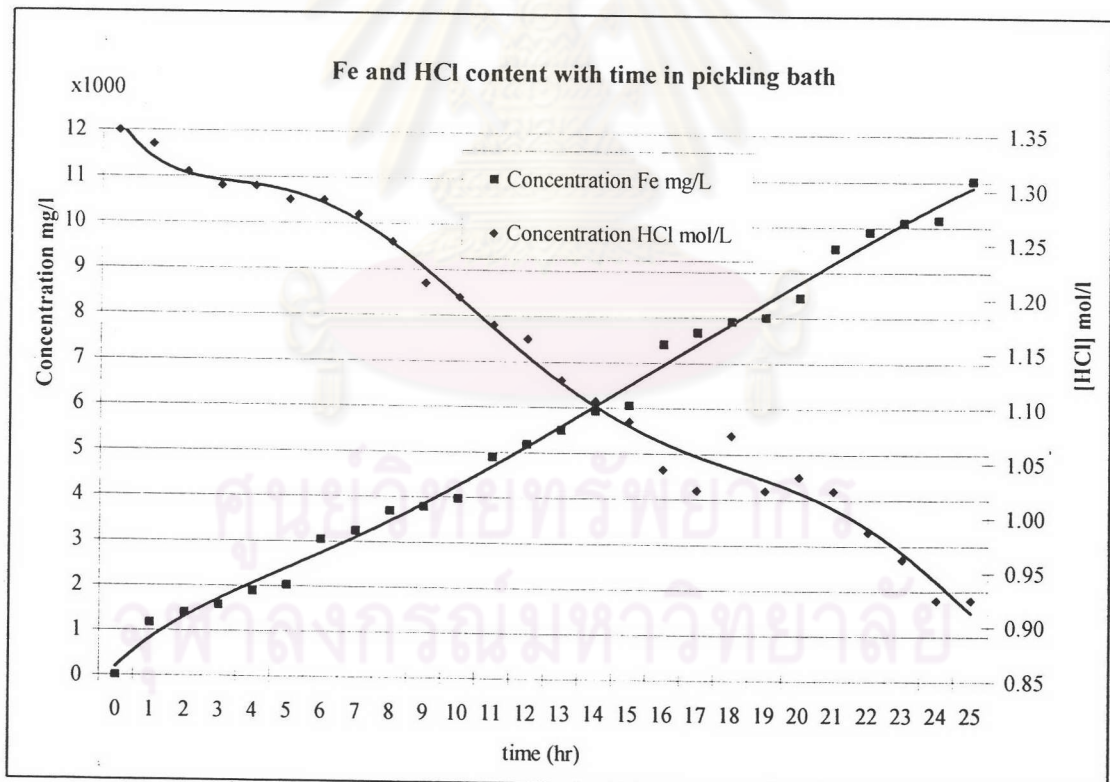
วัตถุประสงค์เพื่อศึกษาองค์ประกอบ และเตรียมกรดเสีย (Pickling Liquors) ที่ได้จากกระบวนการกำจัดสนิมจำลองในห้องปฏิบัติการ เพื่อให้รู้ถึงความเข้มข้นไอออนเหล็กในสารละลายกรดไฮโดรคลอริก และความเข้มข้นสารละลายกรดไฮโดรคลอริก สำหรับการนำกลับกรดไฮโดรคลอริกโดย “กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน” สามารถแบ่งได้ 2 ส่วน

##### 4.2.1 การศึกษาองค์ประกอบกรดเสีย

1. เตรียมกระบวนการกำจัดสนิม ซึ่งประกอบด้วยถังบรรจุกรดไฮโดรคลอริก 5% ประมาณ 1.35 โมลต่อลิตร จำนวน 30 ลิตร

- เตรียมสารละลายกรดไฮโดรคลอริก โดยเจือจางด้วยน้ำกลั่น จากกรดไฮโดรคลอริกเข้มข้น 35% ให้ได้กรดไฮโดรคลอริก 5% จำนวน 30 ลิตร
- นำแท่งเหล็กที่มีสนิมจำนวน 80 แท่ง น้ำหนักประมาณ 9,900 กรัม แช่ในถังบรรจุกรดไฮโดรคลอริก โดยทำการเปลี่ยนแท่งเหล็กชุดใหม่ทุกๆ 5 ชั่วโมง จนครบ 25 ชั่วโมงที่กำหนด
- นำกรดเสียไปวิเคราะห์หาความเข้มข้นไอออนเหล็ก และความเข้มข้นกรดทุกๆ 1 ชั่วโมง
- วิเคราะห์หาความเข้มข้นไอออนเหล็ก ด้วยเครื่องวิเคราะห์ไอออนเหล็ก (Atomic Absorption Spectrometer) Varian Spectr Model AA-300
- วิเคราะห์หาความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก ด้วยการไตเตรต กับ โซเดียมไฮดรอกไซด์ ความเข้มข้น 0.5 mol/l

ผลการทดลองแสดงดังรูปที่ 4.1 แสดงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นไอออนเหล็กที่เพิ่มขึ้นจนมีความเข้มข้นสูงถึง 11,000 มิลลิกรัมต่อลิตร และความเข้มข้นกรดที่ลดลงจาก 1.35 โมลต่อลิตร เหลือ 0.93 โมลต่อลิตร



รูปที่ 4.1 แสดงความเข้มข้นไอออนเหล็ก และความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก

#### 4.2.2 การเตรียมกรดเสีย

หลังจากศึกษาองค์ประกอบกรดเสีย สามารถกำหนดระยะเวลาในการกำจัดสนิมเหล็ก 15 ชั่วโมง ในการเตรียมกรดเสียแต่ละครั้งได้ความเข้มข้นไอออนเหล็ก 6,250 – 6,550 มิลลิกรัมต่อลิตร  $Fe^{2+}(II)/Fe^{3+}(III)$  และความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริกอยู่ที่ 0.9833 – 0.9880 โมลต่อลิตร ตามตารางที่ 4.1 ซึ่งจะป้อนเข้าสู่กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออนต่อไป

ตารางที่ 4.1 แสดงองค์ประกอบกรดเสียตัวอย่างที่วิเคราะห์ได้ ณ เวลาเริ่มต้นก่อนป้อนเข้าสู่กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน

องค์ประกอบกรดเสีย	ความเข้มข้นไอออนเหล็ก (มิลลิกรัมต่อลิตร)	ความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก (โมลต่อลิตร)
กรดเสีย#1	6,360	0.9880
กรดเสีย#2	6,280	0.9833
กรดเสีย#3	6,340	0.9880
กรดเสีย#4	6,250	0.9840
กรดเสีย#5	6,550	0.9858

#### 4.3 ขั้นตอนการทดลอง กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน

วัตถุประสงค์เพื่อศึกษาอัตราการไหลมีผลต่อการแลกเปลี่ยนไอออนสำหรับการดูดซับไอออนบวก  $Fe^{2+}(II)/Fe^{3+}(III)$  และ การดูดซับไอออนลบ  $FeCl_4^-$  พร้อมทั้งศึกษาการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นไอออนเหล็ก กับเวลา ศึกษาประสิทธิภาพการดูดซับของการแลกเปลี่ยนไอออนบวกและไอออนลบ และเก็บข้อมูลสำหรับการฝึกช่างานนิเวศ

##### 4.3.1 เตรียมกระบวนการแลกเปลี่ยนไอออนแบบฟีกเบต 2 หอประกอบด้วย

ตารางที่ 4.2 แสดงชนิดเรซิน และปริมาณเรซินที่ใช้ในการทดลอง

ชนิดเรซินที่บรรจุลงในกระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน	ปริมาณเรซินที่บรรจุ (ลิตร)
1. คอลัมน์สำหรับแลกเปลี่ยนไอออนบวก (Cation Resin)	13
2. คอลัมน์สำหรับแลกเปลี่ยนไอออนลบ (Anion Resin)	13



4.3.2 ป้อนกรดเสียที่ได้จากขั้นตอนการเตรียมกรดเสีย เข้าสู่กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน โดยทำการเปลี่ยนแปลงอัตราการไหลตามตารางที่ 4.3 ดังนี้

ตารางที่ 4.3 แสดงการทดลองโดยการเปลี่ยนแปลงอัตราการไหล

	ความเข้มข้นไอออนเหล็ก (มิลลิกรัมต่อลิตร)	ความเข้มข้นกรด ไฮโดรคลอริก (โมลต่อลิตร)	อัตราการไหล (ลิตรต่อชั่วโมง)
การทดลองที่ 1	6,360	0.9880	110
การทดลองที่ 2	6,280	0.9833	140
การทดลองที่ 3	6,340	0.9880	160
การทดลองที่ 4	6,250	0.9840	180
การทดลองที่ 5	6,550	0.9858	200

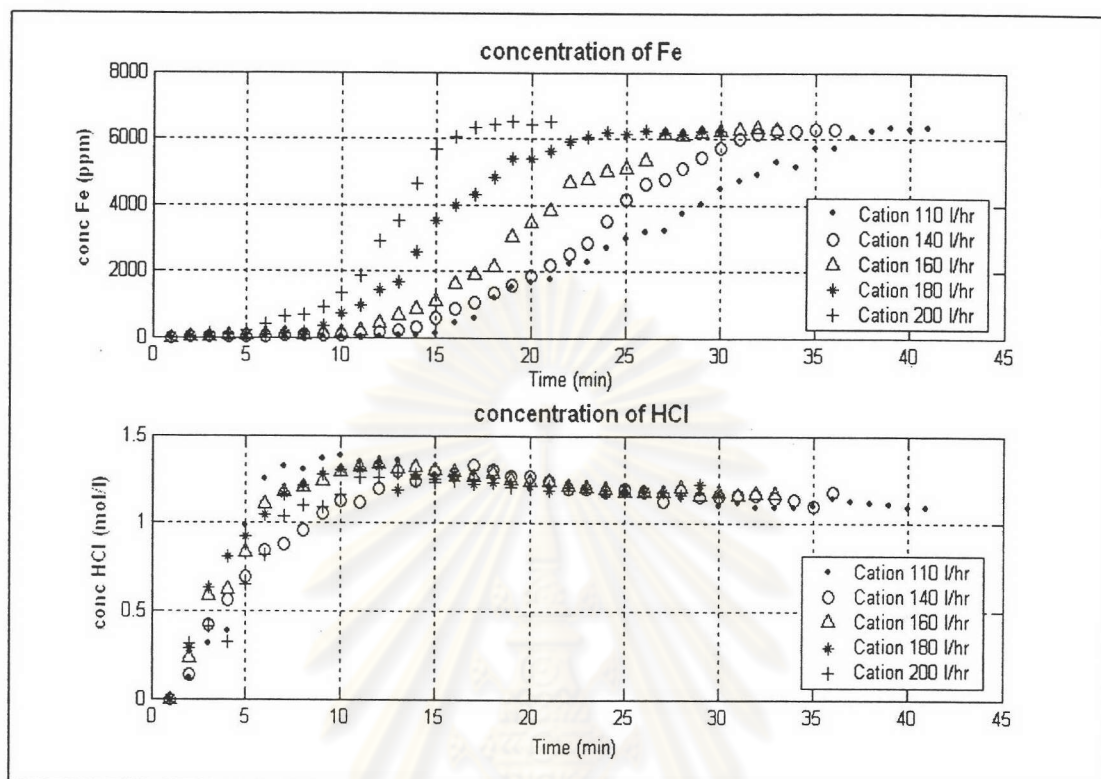
4.3.3 ป้อนกรดเสียเข้าสู่หอเรซินแลกเปลี่ยนไอออนบวกก่อน เนื่องจากองค์ประกอบกรดเสียส่วนใหญ่เป็นไอออนบวก  $Fe^{2+} (II) / Fe^{3+} (III)$  โดยความเข้มข้นไอออนเหล็กด้านขาออกช่วงแรกๆ วิเคราะห์ได้มีค่าน้อยมาก เมื่อเวลาผ่านไป ความเข้มข้นไอออนเหล็กด้านขาออกค่อยๆ เพิ่มขึ้นจนมีความเข้มข้นไอออนเหล็กเท่ากับความเข้มข้นเริ่มต้น ซึ่งแสดงถึงการดูดซับอิ่มตัวจึงหยุดการแลกเปลี่ยนไอออนบวก และทำการบันทึกปริมาณกรดเสียที่ผ่านเข้าสู่การแลกเปลี่ยนไอออนบวก

4.3.4 ป้อนกรดเสียที่ผ่านการบำบัดน้ำไอออนบวกแล้ว ทำการเปลี่ยนประจุที่เหลือให้กลายเป็นไอออนลบเชิงซ้อน  $FeCl_4^-$  โดยใช้  $H_2O_2$  ในอัตราส่วน 1 : 100 ของกรดเสีย หลังจากนั้นจึงนำกรดเสียที่ได้ผ่านเข้าสู่หอเรซินแลกเปลี่ยนไอออนลบ และทำการบันทึกปริมาณกรดเสียที่ผ่านเข้าสู่การแลกเปลี่ยนไอออนลบ

4.3.5 การเก็บข้อมูลในการทดลอง ทั้ง 2 คอลัมน์ ดังตัวอย่างมาวิเคราะห์ความเข้มข้นไอออนเหล็กและความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริกทุกๆ 5 นาที

#### 4.3.6 จากการทดลองเราสามารถเก็บข้อมูลได้ดังนี้

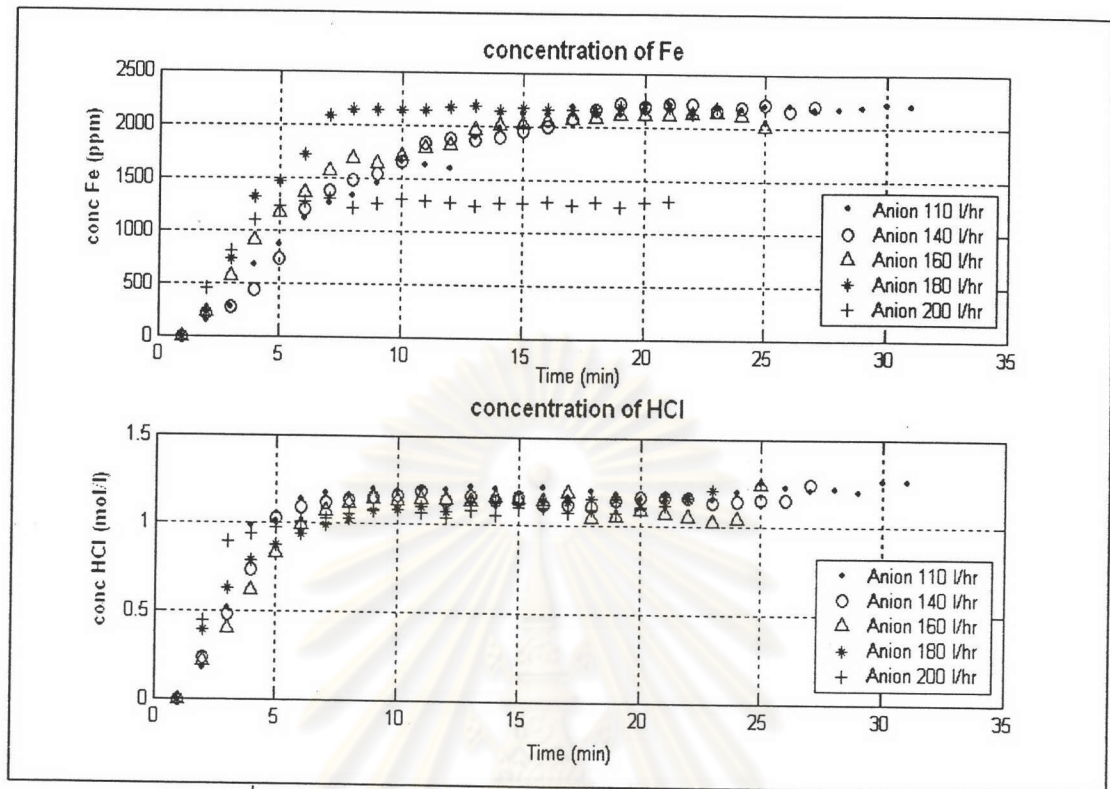
##### 1. ความเข้มข้นไอออนเหล็ก และความเข้มข้นกรด สำหรับการแลกเปลี่ยนไอออนบวก



รูปที่ 4.2 แสดงผลการทดลองของหोरเรซินแลกเปลี่ยนไอออนบวก

จากผลการทดลองที่เปลี่ยนแปลงอัตราการไหลเข้าในหोरเรซินส่งผลให้การดูดซับมีพฤติกรรมที่ต่างกันโดยขณะที่อัตราการไหลเพิ่มขึ้นจะทำให้เรซินนั้นอิ่มตัวเร็ว เริ่มต้นความเข้มข้นไอออนเหล็กจะออกมาน้อยมากจนไม่สามารถวัดได้ จากรูปจึงมีค่าประมาณศูนย์ จนกระทั่งเรซินดูดซับได้ระยะเวลาหนึ่งความเข้มข้นไอออนเหล็กตรงๆออกค่อยๆเพิ่มมากขึ้น เนื่องจากเรซินค่อยๆ อิ่มตัว ซึ่งเป็นช่วงที่เส้นกราฟเปลี่ยนแปลงอย่างรวดเร็ว ณ จุดนี้ความเข้มข้นไอออนเหล็กจะค่อยๆเพิ่มมากขึ้นจนกระทั่ง มีความเข้มข้นเท่ากับความเข้มข้นเริ่มต้น ซึ่งหมายความว่าเรซินไม่สามารถดูดซับได้อีก จึงจำเป็นต้องทำการฟื้นฟูสภาพ ในกรณีของเรซินแลกเปลี่ยนประจุบวก สารที่นำมาฟื้นฟูสภาพในการทดลองนี้คือกรด และเรายังสามารถพิจารณาลักษณะกราฟของการดูดซับในทางคณิตศาสตร์ได้ว่าระบบจะมีความไม่เป็นเชิงเส้นสูงในช่วงที่เรซินกำลังอิ่มตัว โดยมีข้อมูลอยู่ที่ภาคผนวก ข

## 2. ความเข้มข้นไอออนเหล็ก และความเข้มข้นกรด สำหรับการแลกเปลี่ยนไอออนลบ



รูปที่ 4.3 แสดงผลการทดลองของหอเรซินแลกเปลี่ยนไอออนลบ

### 4.3.7 การศึกษาประสิทธิภาพการดูดซับของการแลกเปลี่ยนไอออน

เพื่อแสดงถึงประสิทธิภาพในการดูดซับไอออนเหล็กของเรซิน สำหรับการทดลองนี้ใช้เปรียบเทียบประสิทธิภาพจาก ปริมาณ กับความเข้มข้นไอออนเหล็กเริ่มต้น และ ปริมาณ กับความเข้มข้นไอออนเหล็กสิ้นสุด ส่วนการนำกลับกรดไฮโดรคลอริกที่ระบบสามารถพิจารณาได้จากการเพิ่มความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก ทั้งหมดนี้ใช้หาประสิทธิภาพของการแลกเปลี่ยนไอออน และการนำกลับกรดที่มีอัตราการไหลต่างกัน



#### 4.4 ขั้นตอนการทดลอง ข่ายงานนิวรัล สำหรับสร้างแบบจำลอง

##### 4.4.1 การแบ่งช่วงข้อมูล

หลังจากได้ข้อมูลจากการทดลองแล้ว ในช่วงแรกของงานวิจัยได้ทดลองนำข้อมูลเหล่านี้มาฝึก และทดสอบข่ายงาน ปรากฏว่าข่ายงานไม่สามารถทำนายความเข้มข้นไอออนเหล็ก และความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริกได้ดี จึงมีการปรับปรุงการจำลองโดยการแบ่งช่วงข้อมูลความเข้มข้นไอออนเหล็กออกเป็น 2 ช่วง โดยช่วงที่ 1 อยู่ระหว่าง 0-3000 ppm เรียกว่า Cation Range1 และช่วงที่ 2. อยู่ระหว่าง 3000 – 6000 ppm เรียกว่า Cation Range2 ซึ่งสามารถให้ผลการทำนายที่ดีกว่า ส่วนการแลกเปลี่ยนประจุลบไม่มีการแบ่งช่วงข้อมูล คือใช้ความเข้มข้นไอออนเหล็กที่ 0-2000 ppm ดังตารางที่ 4.4

ตารางที่ 4.4 แสดงการแบ่งช่วงข้อมูลสำหรับการฝึกข่ายงาน

ชนิดเรซิน	ความเข้มข้น (ppm)
เรซินแลกเปลี่ยนประจุบวก1 (Cation Range1)	0-3000
เรซินแลกเปลี่ยนประจุบวก2 (Cation Range2)	3000-6000
เรซินแลกเปลี่ยนประจุลบ (Anion)	0-2000

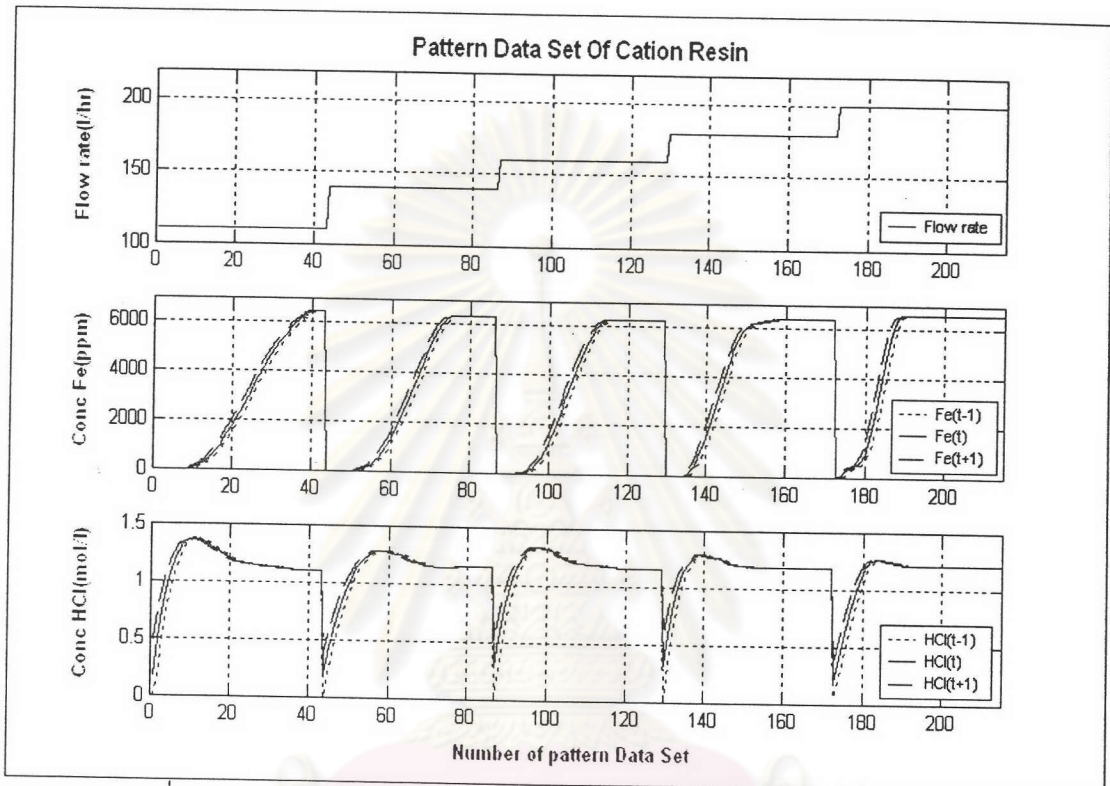
##### 4.4.2 การจัดชุดรูปแบบข้อมูล (Pattern Data Set)

เมื่อได้ข้อมูลจากการทดลองแล้ว ขั้นตอนต่อไปเป็นการจัดชุดรูปแบบข้อมูลสำหรับการฝึกข่ายงาน โดยเราจะแบ่งออกเป็น 2 ส่วนคือ 1. สำหรับฝึกข่ายงาน 2. สำหรับทดสอบข่ายงาน โดยชุดข้อมูลอินพุต และข้อมูลเอาต์พุตที่กำหนดนั้นจะมีลักษณะดังนี้

$$x = \begin{bmatrix} F \\ C_a(t) \\ C_s(t) \\ C_a(t-1) \\ C_s(t-1) \end{bmatrix}, y = \begin{bmatrix} C_a(t+1) \\ C_s(t+1) \end{bmatrix} \quad \text{สมการ 4.1}$$

สมการนี้แสดงข้อมูลอินพุต และเอาต์พุตจำนวน 1 ชุดข้อมูล ที่ประกอบด้วย อัตราการไหลของกรดเสีย (ลิตรต่อชั่วโมง)  $F$ , ความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก (โมลต่อลิตร)  $C_a$  และความเข้มข้นไอออนเหล็ก (ppm)  $C_s$  โดยกำหนดให้ส่วนของข้อมูลอินพุต  $x$  ประกอบด้วยข้อมูล ณ เวลาปัจจุบันคือ  $C_a(t), C_s(t)$  และข้อมูล ณ เวลาในอดีต หนึ่งช่วงเวลาคือ  $C_a(t-1), C_s(t-1)$  ส่วนในชุดข้อมูลเอาต์พุต  $y$  ประกอบด้วยข้อมูล ณ เวลาในอนาคต หนึ่งช่วงเวลาคือ  $C_a(t+1), C_s(t+1)$  ซึ่งในชุดข้อมูลเอาต์พุตนี้จะเป็นข้อมูลสำหรับการนำมาทำนายค่าความเข้มข้น

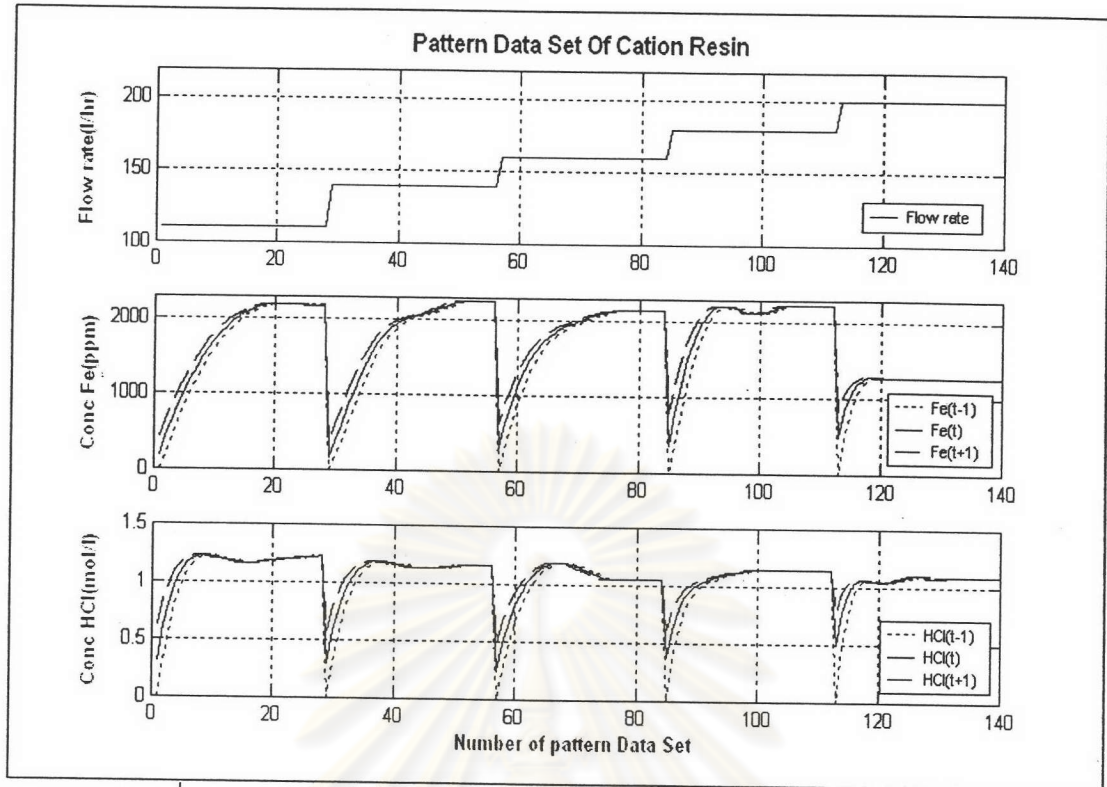
กรด และความเข้มข้นไอออนเหล็ก จากการจำลองเราสามารถนำชุดข้อมูลดิบทั้งหมด มาจัดชุดข้อมูลได้ทั้งสิ้น 215 ชุดข้อมูลสำหรับการแลกเปลี่ยนไอออนประจุบวก และ 140 ชุดข้อมูลสำหรับการแลกเปลี่ยนไอออนประจุลบ โดยนำไปใช้สำหรับในการฝึกช่ายงาน 60% และสำหรับทดสอบช่ายงานอีก 40% ดังรูปที่ 4.4 และ 4.5



รูปที่ 4.4 แสดงการจัดรูปแบบชุดข้อมูลสำหรับหอเรซินแลกเปลี่ยนไอออนบวก

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย





รูปที่ 4.5 แสดงการจัดรูปแบบชุดข้อมูลสำหรับหอเรซินแลกเปลี่ยนไอออนลบ

โดยรูปที่ 4.4, 4.5 ทั้งสองแสดงถึงรูปแบบชุดข้อมูลของความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก และความเข้มข้นไอออนเหล็ก ทั้งสามช่วงเวลาตั้งแต่ เวลาปัจจุบัน เวลาในอดีต และเวลาในอนาคต ที่เกิดการเปลี่ยนแปลงอัตราการไหลของกรดเสีย ในการฝึกข่ายงานชุดข้อมูลเหล่านี้จะแบ่งออกเป็น 2 ชุดด้วยการสุ่ม โดย ในการแลกเปลี่ยนประจุบวก มีชุดข้อมูล 215 ชุดข้อมูล แบ่งเป็นชุดการฝึกข่ายงาน 129 ชุดข้อมูล (60%) และ ชุดสำหรับทดสอบข่ายงาน 86 ชุดข้อมูล (40%) ส่วนการแลกเปลี่ยนประจุลบ มีชุดข้อมูล 140 ชุดข้อมูล แบ่งเป็นชุดการฝึกข่ายงาน 84 ชุดข้อมูล (60%) และ ชุดสำหรับทดสอบข่ายงาน 56 ชุดข้อมูล (40%)

#### 4.4.3 การออกแบบโครงข่ายงาน

การออกแบบแบบจำลองข่ายงานนิเวศด้วยการฝึกข่ายงานด้วยอัลกอริทึมการกระจายความผิดพลาดย้อนกลับ (Error Backpropagation Algorithm) เป็นที่นิยมอย่างมาก ส่วนการหาค่าถ่วงน้ำหนักที่เหมาะสมที่สุด ด้วยการอพติไมซ์แบบ รีเวนเบิร์ก-มาร์ควอดท์ (Levenberg-Marquardt Method) เนื่องจากวิธีนี้เหมาะสำหรับแก้ปัญหาเกี่ยวกับแบบจำลองที่มีความซับซ้อนสูง ทำการจำลองโดยใช้ Neural Network Toolbox โปรแกรม MATLAB

**กรณีที่ 1** การออกแบบข่ายงานป้อนไปข้างหน้าชั้นซ่อน 1 ชั้น (Feedforward Single Hidden Layer)

จำลองข่ายงานที่มีโครงสร้างชั้นซ่อน 1 ชั้น โดยเปลี่ยนแปลงจำนวนนิวรอน (Neuron Node) ในชั้นซ่อนตั้งแต่ 3, 5, 7, 8, 9, 11, 13, 15, 17 และ 19 โหนด รูปที่ 4.6

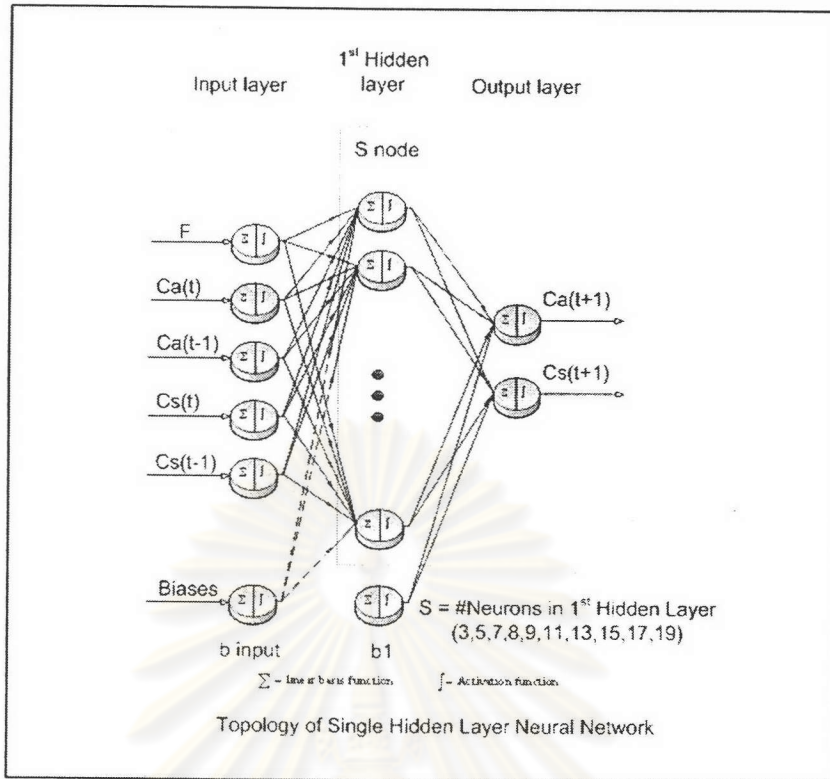
**กรณีที่ 2** การออกแบบข่ายงานป้อนไปข้างหน้าชั้นซ่อน 2 ชั้น (Feedforward Two Hidden Layers)

จำลองข่ายงานที่มีโครงสร้างชั้นซ่อน 2 ชั้น โดยเปลี่ยนแปลงจำนวนนิวรอน (Neuron Node) ในชั้นซ่อนที่ 1 ตั้งแต่ 3, 8, 11 และ 13 โหนด ส่วนชั้นซ่อนที่ 2 ตั้งแต่ 3, 5, 7, 8, 9, 11, 13 และ 15 โหนด รูปที่ 4.7

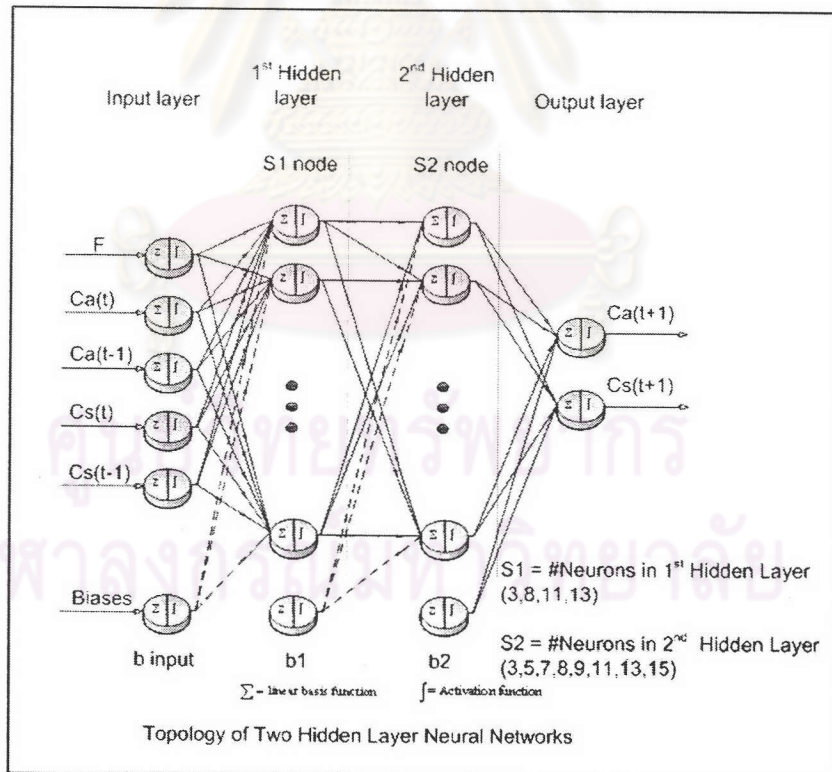
องค์ประกอบทั้งหมดสามารถสรุปได้ดังนี้

Training Algorithm	:	Back Propagation Algorithm
Basis Function	:	Linear Basis Function
Transfer Function	:	Sigmoid Function
Input Signals Data	:	Flow Rate, Steel Ion and Hydrochloric Concentration
Output Signals Data	:	Steel Ion Concentration, Hydrochloric Concentration
To Predict	:	Steel ion Concentration Profile, Hydrochloric Concentration

โดยในแต่ละนิวรอนใช้ฟังก์ชันกระตุ้นซิกมอยด์ และได้รับการเรียนรู้ โดยใช้วิธีรีเวนเบอกร์-มาร์ควอर्ट (Levenberg–Marquardt) สำหรับการลดค่าความคลาดเคลื่อน ระหว่างค่าจริงจากกระบวนการ และ ค่าที่ได้จากข่ายงาน โดยจำนวนรอบการฝึกข่ายงาน (Epoch) ขึ้นกับฟังก์ชันค่าความผิดพลาดแบบกำลังสองเฉลี่ย (Mean Square Error) เมื่อค่า MSE น้อยสุดที่ 0.001 การเรียนรู้จะหยุด และนำข่ายงานนี้ไปทดสอบเพื่อใช้เป็นตัวแทนของระบบต่อไป



รูปที่ 4.6 แสดงการออกแบบข่ายงานป้อนไปข้างหน้าชั้นซ่อน 1 ชั้น



รูปที่ 4.7 แสดงการออกแบบข่ายงานป้อนไปข้างหน้าชั้นซ่อน 2 ชั้น



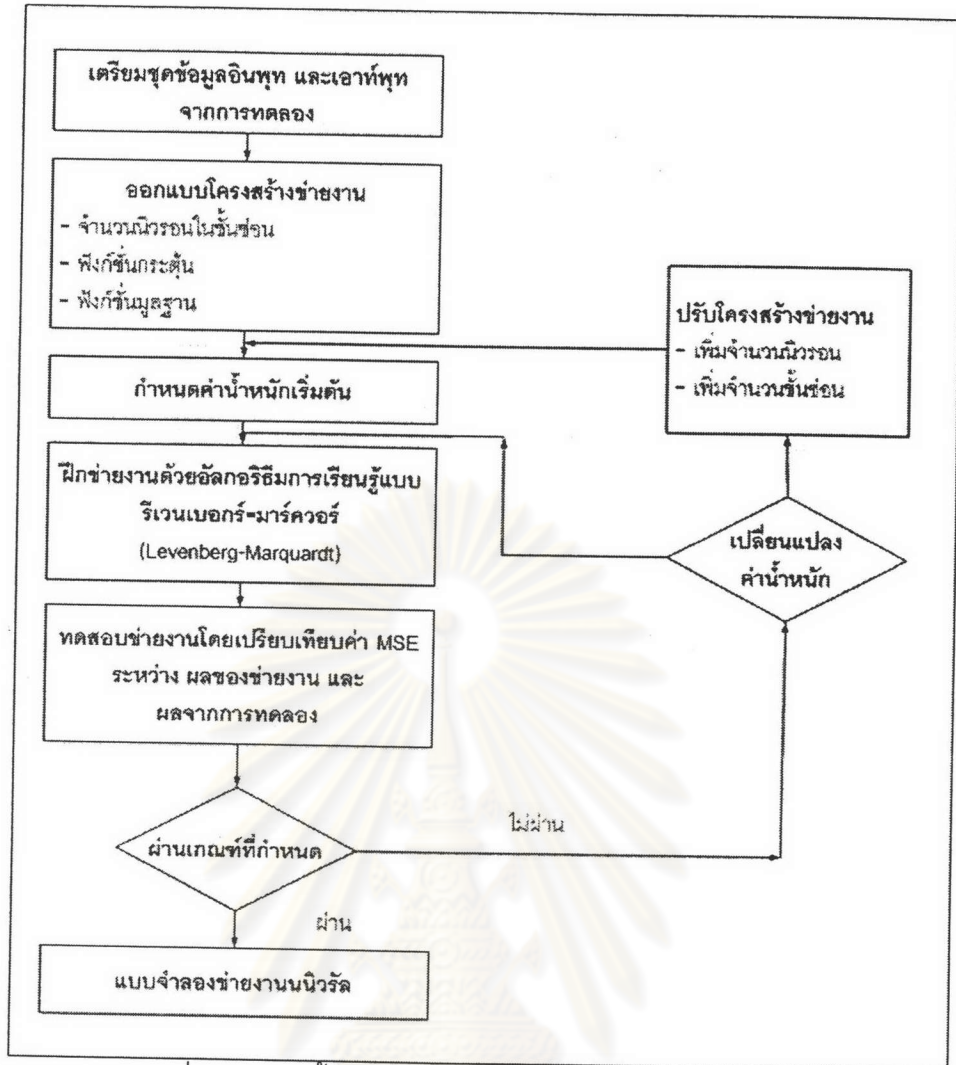
ตารางที่ 4.2 แสดงจำนวนข่ายงานทั้งหมด

ลักษณะข่ายงาน	สำหรับ	จำนวนข่ายงาน	ชั้นซ่อน1(โนด)	
Single Layer	Cation Range1	10	3,5,7,8,9,11,13,15,17,19	
	Cation Range2	10	3,5,7,8,9,11,13,15,17,19	
	Anion	10	3,5,7,8,9,11,13,15,17,19	
ลักษณะข่ายงาน	สำหรับ	จำนวนข่ายงาน	ชั้นซ่อน1(โนด)	ชั้นซ่อน 2(โนด)
Two Layer	Cation Range1	32	3,8,11,13	3,5,7,8,9,11,13
	Cation Range2	32	3,8,11,13	3,5,7,8,9,11,13
	Anion	32	3,8,11,13	3,5,7,8,9,11,13
รวม		126	ข่ายงาน	

ขั้นตอนของโปรแกรมสำหรับการฝึกข่ายงาน และการทดสอบข่ายงาน

1. การเตรียมชุดข้อมูลอินพุต และ เอาท์พุท มาใช้สำหรับ ฝึกข่ายงาน และทดสอบข่ายงาน
2. ออกแบบโครงสร้างข่ายงาน ตั้งแต่จำนวนชั้นซ่อน จำนวนนิวรอนในแต่ละชั้นซ่อน เป็นต้น
3. กำหนดค่าเริ่มต้นของค่าถ่วงน้ำหนัก ส่วนใหญ่ใช้ค่าถ่วงน้ำหนักแบบสุ่ม
4. ทำการฝึกข่ายงานใช้ โปรแกรม MATLAB โดยใช้อัลกอริทึมแบบเวนเบอเกอร์ – มาร์ควอร์ และทำการออปติไมซ์ฟังก์ชันค่าความผิดพลาดแบบกำลังสองเฉลี่ย (MSE) น้อยสุด
5. นำข่ายงานที่ได้มาทดสอบ ว่าสามารถทำให้ค่าความผิดพลาดแบบกำลังสองเฉลี่ย (MSE) ตามที่กำหนดได้ หรือไม่
6. ถ้าไม่ได้ โปรแกรมจะทำการกำหนดปรับค่าถ่วงน้ำหนักใหม่ แล้วเริ่มฝึกข่ายงานอีกรอบ ทำจนกว่า การทดสอบข่ายงานได้ค่าความผิดพลาดแบบกำลังสองเฉลี่ย ตามที่กำหนด
7. สุดท้ายทำการเปลี่ยนแปลงโครงสร้างข่ายงานเพื่อดูว่าข่ายงานใดให้ ค่าความผิดพลาดแบบกำลังสองเฉลี่ยน้อยสุดในชุดข้อมูลทดสอบ จึงนำข่ายงานนั้นไปใช้ทำนาย หรือเป็นตัวแทนของระบบ (Identification of Models)

ดังนั้นในการจำลองจึงมีการออกแบบข่ายงานจำนวนมากโดยใช้การลองผิดลองถูก (Trial and Error) เพื่อทำการค้นหาข่ายงานที่สามารถใช้เป็นแบบจำลองที่เป็นตัวแทนของระบบที่ดีที่สุด



รูปที่ 4.8 แสดงขั้นตอนของโปรแกรมในการหาแบบจำลอง

#### 4.4.4 การคัดเลือกข่ายงาน

สำหรับการพิจารณาคัดเลือกข่ายงานที่เหมาะสมสำหรับใช้เป็นแบบจำลอง ในงานวิจัยนี้ได้นำดัชนีมาเปรียบเทียบเพื่อเป็นตัวตัดสินใจว่าจะเลือกใช้ข่ายงานใด คือ ค่า Mean Square Error (MSE) และ ค่า Root Mean Square Error (RMS) ซึ่งพิจารณาจากความแตกต่างระหว่างผลจากการทำนาย และ ผลจากกระบวนการจริง โดยเลือกข่ายงานที่สามารถให้ ค่า MSE และ RMS นี้ต่ำสุด ดังนี้

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2 \quad \text{สมการที่ 4.2}$$

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2} \quad \text{สมการที่ 4.3}$$

#### 4.4.5 การเปรียบเทียบผลการทำนาย

สำหรับการพิจารณาผลการทำนายของแบบจำลองที่ได้รับการคัดเลือก ในงานวิจัยนี้ได้นำค่าฟังก์ชันประสิทธิภาพ (Performance Function) ที่ใช้สำหรับทดสอบ ซึ่งอ้างอิงจากบทความของ LeiZhi Chen และคณะ (1998) ซึ่งสามารถบอกเปอร์เซ็นต์ค่าความผิดพลาดระหว่าง เอาท์พุทของข่ายงาน กับ ค่าจากข้อมูลจริงได้แก่

- Root Mean Square Percent Error Index (RMSP Error Index)

$$\text{RMSP Error index} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - p_i)^2}{\sum_{i=1}^n p_i^2}} \times 100 \quad \text{สมการที่ 4.4}$$

- Maximum Percent Error Index (MP Error Index)

$$\text{MP Error index} = \frac{\max |y_i - p_i|}{\max |p_i|} \times 100 \quad \text{สมการที่ 4.5}$$

#### 4.4.6 การแก้ปัญหสมการอนุพันธ์ย่อย ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

ในขั้นตอนสุดท้าย เป็นการนำสมการการดูดซับพื้นฐานมาแก้สมการอนุพันธ์ย่อย ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข สำหรับการศึกษากฎการทางพลศาสตร์ของการดูดซับ โดยใช้ไฟล์ความเข้มข้น (Concentration Profile) ที่แสดงถึงความสัมพันธ์ระหว่าง เวลา และความเข้มข้นเหล็กขาออก ซึ่งในงานวิจัยที่ผ่านมาได้มีการใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (PDE) สำหรับทำนายลักษณะของการเปลี่ยนแปลงนี้ โดยใช้การจำลองเชิงตัวเลข (Numerical Simulation) ในงานวิจัยนี้ใช้วิธี The Method of Line (MOL) สำหรับการทำนายเปรียบเทียบผลการดูดซับ ระหว่างผลการทดลอง และผลที่ได้จากการทำนายโดยใช้ ข่ายงานนิวรัล

สมการการดูดซับพื้นฐาน

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{F_L}{\varepsilon A_c} \frac{\partial c}{\partial z} + D_L \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \frac{3}{R_p} k_f (c - c_p) \quad \text{สมการที่ 4.6}$$

มีการกำหนดเงื่อนไขดังนี้ (Dimensionless)

$$\text{BC} \quad c(Z=0, \tau) = c_0$$

$$\frac{\partial c(Z=L, \tau)}{\partial Z} = 0$$

$$\text{IC} \quad c(Z, \tau=0) = 0$$



#### 4.5 สรุปขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

##### 4.5.1 ขั้นตอนการศึกษากระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน

1. เตรียมการทดลองกระบวนการแลกเปลี่ยนไอออน
2. วิเคราะห์หาความเข้มข้นไอออนเหล็ก และ ความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริกที่ได้จากการทดลอง ณ เวลาเริ่มต้น และสิ้นสุด
3. นำข้อมูลผลการทดลอง มาวิเคราะห์เพื่อหาประสิทธิภาพการดูดซับ และการนำกลับกรด
4. วิเคราะห์ความเป็นไปได้ของประสิทธิภาพที่กระบวนการแลกเปลี่ยนไอออนนี้ทำได้

##### 4.5.2 ขั้นตอนการศึกษาแบบจำลองข่ายงานนิวรัล

1. รวบรวม และเก็บข้อมูลอินพุต และเอาต์พุต จากการทดลองทุกๆ 5 นาที
2. แบ่งข้อมูลที่ได้เป็น 2 ชุด คือ ข้อมูลสำหรับการฝึกข่ายงาน และข้อมูลสำหรับทดสอบข่ายงาน
3. จัดชุดรูปแบบข้อมูลสำหรับการฝึกข่ายงาน
4. ออกแบบโครงสร้างข่ายงานนิวรัล
5. ทำการฝึกและทดสอบข่ายงาน พร้อมทั้งคัดเลือกข่ายงาน เพื่อให้เป็นแบบจำลอง
6. นำแบบจำลองที่ได้ไปทำนายความเข้มข้นกรดไฮโดรคลอริก และ ความเข้มข้นไอออนเหล็ก

##### 4.5.3 ขั้นตอนการเปรียบเทียบผลการทำนาย

1. เปรียบเทียบผลการทำนายโดยใช้เปอร์เซ็นต์ความผิดพลาด RMSP (Root Mean Square Percent Error)
2. นำผลการทำนายที่ได้เปรียบเทียบ ระหว่าง ผลจากการทดลอง (Experiment) ผลจากแบบจำลองข่ายงานนิวรัล (Neural Network Model) และผลที่ได้จากการแก้ปัญหาคณิตศาสตร์ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (Numerical Simulation)