บทที่ 4

โปรแกรมคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค โดยใช้ระเบียบวิธีของทูมี

การวิเคราะห์การกระจายขนาด(แบบสะสม)ของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอน เป็นวิธีที่เป็นมาตรฐานทางอุตสาหกรรมในประเทศญี่ปุ่น แต่เครื่องมือวัดขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่มีในปัจจุบันเป็นเครื่องมือที่ใช้งานยาก เนื่องจากมีขั้นตอนการวิเคราะห์ผลที่ซับซ้อนดังที่ได้กล่าวมาแล้ว ทั้งยังต้องใช้เวลาในการทำการทดลองนานสำหรับการวัดขนาดของอนุภาคที่มีขนาดเล็ก แต่เนื่องจากเครื่องวิเคราะห์การกระจายขนาดโดยวิธีการตกตะกอนเป็นเครื่องวิเคราะห์ที่มีหลักการทำงานเป็นแบบง่ายๆ และเป็นเครื่องวิเคราะห์ที่มีราคาย่อมเยากว่าเครื่องวิเคราะห์แบบอื่นมาก (เช่น light scattering, laser diffraction เป็นต้น) ดังนั้นบริษัทผู้ผลิตจึงไม่สนใจที่จะปรับปรุงเครื่องวิเคราะห์มาตรฐาน JIS นี้ให้ใช้งานได้สะดวกรวดเร็วขึ้น ด้วยเหตุนี้งานวิทยานิพนธ์ฉบับนี้จะเสนอระเบียบวิธีคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคแบบใหม่โดยการนำวิธีนอนลิเนียร์อิเทอเรทีฟอินเวอร์ชันของทูมี (*Twomey's nonlinear iterative inversion*) มาประยุกต์ใช้คำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคจากข้อมูลการทดลองโดยตรง เพื่อช่วยลดขั้นตอนในการประมวลผล รวมทั้งนำระเบียบวิธีของทูมีมาใช้ทำนายค่าการกระจายขนาดของอนุภาค ณ ตำแหน่งที่ยังไม่มีข้อมูลการทดลอง (extrapolate ผลการทดลองอย่างแม่นยำ) เพื่อช่วยลดระยะเวลาในการทดลอง โปรแกรมคำนวณการกระกระจายขนาดของอนุภาคโดยใช้ระเบียบวิธีของทูมีที่พัฒนาขึ้นเรียกว่าโปรแกรม SEDI-2Me

ในหัวข้อ 4.1, 4.2 และ 4.3 จะกล่าวถึงรายละเอียดของระเบียบวิธีการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคแบบใหม่ และขั้นตอนการทำงานของโปรแกรมตามลำดับ เนื่องจากในงานนี้มีการพัฒนาโปรแกรมคอมพิวเตอร์ควบคู่ไปด้วย ดังนั้นจึงมีความจำเป็นต้องตรวจสอบความถูกต้องของการทำงานของโปรแกรมซึ่งจะได้กล่าวถึงในหัวข้อ 4.4

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

4.1 ระเบียบวิธีของทูมีสำหรับคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค

ระเบียบวิธีการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคแบบใหม่ จะอาศัยเทคนิคนอนลิเนียร์อิเทอเรทีฟอินเวอร์ชันของทูมี (ดูรายละเอียดในหัวข้อ 2.3 ของบทที่ 2) เพื่อแก้สมการการคำนวณค่าน้ำหนักเปอร์เซ็นต์ของอนุภาคที่ตกตะกอนบนจานรับน้ำหนัก ณ เวลาใดๆ กล่าวคือสมการที่ (2.14) เพื่อหาฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคที่ต้องการ ดังต่อไปนี้

จากสมการ (2.14) สำหรับคำนวณค่าน้ำหนักเปอร์เซ็นต์ของอนุภาคที่ตกตะกอน ณ เวลา t ใดๆ สามารถหาค่าน้ำหนักของอนุภาคที่สะสมบนจานรับน้ำหนัก ณ เวลาใดๆ G(t) ได้โดยการจัดรูปสมการที่ (2.14) ใหม่ จะได้

$$G(t) = G_0\left[\int_{D_{pst}(t)}^{D_{p\max}} f(D_p)dD_p + \int_{0}^{D_{pst}(t)} \frac{V(D_p)t}{h} f(D_p)dD_p\right] \qquad (4.1)$$

โดย	$G(t)$	คือ	น้ำหนักของอนุภาคที่สะสมบนจานรับน้ำหนัก ณ เวลา t ใดๆ (กรัม)
	G_0	คือ	น้ำหนักของอนุภาคที่สะสมบนจานรับน้ำหนักเมื่ออนุภาคทั้งหมดตกตะกอนแล้ว (กรัม)
	$f(D_p)$	คือ	ฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคที่ต้องการหา
	$D_{pst}(t)$	คือ	ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของสโตกส์ (ไมโครเมตร)
	h	คือ	ความลึกจากผิวของเหลวถึงผิวหน้าของจานรับน้ำหนัก (เมตร)
	t	คือ	เวลาในการตกตะกอน (วินาที)
	$V(D_p)$	คือ	ความเร็วในการตกตะกอนของสโตกส์ (เมตร/วินาที)

เทอมแรกของสมการที่ (4.1) หมายถึงน้ำหนักของอนุภาคทั้งหมดที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางตั้งแต่ D_{pst} ถึง D_{pmax} ส่วนเทอมที่สอง หมายถึงน้ำหนักของอนุภาคบางส่วนที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางน้อยกว่า D_{pst} ที่ตกตะกอนลงบนจานรับน้ำหนัก ขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของสโตกส์ สามารถคำนวณได้จาก

$$D_{pst}(t) = \sqrt{\frac{18\mu h}{(\rho_p - \rho_f)gt} * 10^{12}} \quad (4.2)$$

และค่าความเร็วในการตกตะกอนของสโตกส์ $V(D_p)$ คำนวณได้จาก

$$V(D_p) = \frac{(\rho_p - \rho_f)gD_p^2}{18\mu * 10^{12}} \quad (4.3)$$

จัดรูปสมการที่ (4.1) ใหม่ เพื่อใช้สำหรับคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค จะได้

$$G(t_i) = G_0 \int_0^{D_{pmax}} g(t_i, D_{pj}) f(D_{pj}) dD_{pj} \quad (4.4)$$

กำหนดให้ i มีค่าตั้งแต่ 1 ถึง n และ j มีค่าตั้งแต่ 1 ถึง m ส่วนค่า Kernel function คำนวณได้จาก

$$g(t_i, D_{pj}) = \frac{V(D_{pj})t_i}{h} \quad \text{เมื่อ} \quad 0 \le D_{pj} < D_{pst}(t_i) \quad (4.5)$$

$$g(t_i, D_{pj}) = 1 \quad \text{เมื่อ} \quad D_{pst}(t_i) \le D_{pj} \le D_{pmax} \quad (4.6)$$

โดย n คือ จำนวนของข้อมูลที่วัดได้จากการทดลอง

D_{pj} คือ ขนาดของอนุภาคที่ต้องการหาค่าฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค

$g(t_i, D_{pj})$ คือ ค่าความน่าจะเป็นที่อนุภาคขนาดใดๆ จะตกตะกอนลงบนจานรับน้ำหนัก ณ เวลา t ใดๆ (Instrument specific response function หรือเรียกว่า Kernel function)

จะเห็นได้ว่าสมการที่ (4.4) เป็นสมการที่อยู่ในรูปการอินทิเกรตเช่นเดียวกับสมการที่ (2.24) ดังนั้นจึงนำระเบียบวิธีการแก้สมการแบบ Twomey's nonlinear iterative inversion (Twomey algorithm) เข้ามาใช้ในการแก้สมการที่ (4.4) เพื่อใช้คำนวณค่าฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค จะได้

$$f^{k+1}(D_{pj}) = \left[1+\left(\gamma_i^k-1\right)g\left(t_i,D_{pj}\right)\right]f^k\left(D_{pj}\right) \quad (4.7)$$

โดยค่า γ_i^k คำนวณได้จาก

$$\gamma_i^k = \frac{G(t_i)}{G_0\sum_{j=1}^{m}\left[g\left(t_i,D_{pj}\right)f^k\left(D_{pj}\right)\Delta D_p\right]} \quad (4.8)$$

γ_i^k คือ อัตราส่วนระหว่างข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือ กับผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณในแต่ละ iteration และสัญลักษณ์ตัวอักษร k ในสมการที่ (4.7) และสมการที่ (4.8) แสดงถึงผลลัพธ์ชุดใหม่ (k+1) และผลลัพธ์ชุดเก่า (k) ที่เกิดขึ้นระหว่างการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาค

สำหรับการคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคแบบ lognormal ค่า ΔD_p ในสมการที่ (4.8) จะถูกเปลี่ยนเป็น $\Delta \log D_p$

ในการนำ Twomey's algorithm มาใช้คำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคสำหรับข้อมูลที่ได้จากเครื่องวิเคราะห์การกระจายขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนจะมีการเพิ่ม Kernel function ที่ได้จากการประดิษฐ์ ขั้นตอนการปรับเรียบฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค และการกำหนดเกณฑ์หยุดการคำนวณให้กับระเบียบวิธีของทูมีเดิม ดังรายละเอียดต่อไปนี้

4.1.1 การปรับเรียบฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค (Smoothing of solution)

การปรับเรียบฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีของทูมีจะอาศัยเทคนิค three-term moving average ที่มีใช้กันในโปรแกรม STWOM (Markowsky,1987) ดังนี้

$$f(D_{pj}) = 0.25f(D_{pj-1}) + 0.5f(D_{pj}) + 0.25f(D_{pj+1}) \quad (4.9)$$

สำหรับค่าที่ปลายของฟังก์ชัน ซึ่งมีข้อมูลจำกัดเพียง 2 จุด จะทำการปรับเรียบ โดยใช้สมการต่อไปนี้

$$f(D_{p1}) = 0.75f(D_{p1}) + 0.25f(D_{p2}) \quad (4.10)$$

ค่าความหยาบ (Roughness, R) ของผลลัพธ์คำนวณได้จากสมการต่อไปนี้

$$R = \frac{\sum_{j=2}^{m-1} \left| f(D_{pj+1}) + f(D_{pj-1}) - 2f(D_{pj}) \right|}{m-2} \tag{4.11}$$

4.1.2 **วิธีคำนวณค่าซิกม่า (SIGMA)**

การคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคโดยโปรแกรม SEDI-2Me จะหยุดการคำนวณเมื่อค่าน้ำหนักของอนุภาคที่สะสมบนจานรับน้ำหนักที่ได้จากการคำนวณทั้งหมดมีค่าความผิดพลาดอยู่ในช่วงที่กำหนด โดยการคำนวณจะหยุดเมื่อค่าซิกม่ามีค่าน้อยกว่าค่าที่กำหนด (โดยปกติโปรแกรมจะหยุดการคำนวณเมื่อ SIGMA มีค่ามากกว่า 1) ค่าซิกม่าคำนวณได้จาก

$$SIGMA = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left[(y_i - y_i^t)/E_i \right]^2}{n} \tag{4.12}$$

โดย y_i^t คือ ค่าน้ำหนักของอนุภาคที่สะสมบนจานรับน้ำหนักที่ได้จากการคำนวณ

E_i คือ ค่าความผิดพลาดที่ยอมรับได้สำหรับแต่ละข้อมูล y_i

จำนวนครั้งในการคำนวณผลลัพธ์ของโปรแกรม SEDI-2Me จะขึ้นอยู่กับการกำหนดค่า E_i โดยจำนวนครั้งที่ต้องใช้ในการคำนวณจะเพิ่มขึ้นเมื่อค่า E_i ลดลง

4.1.3 **การประดิษฐ์ Kernel function**

kernel function (หรือ instrument specific response function) ของเครื่องวิเคราะห์การกระจายขนาดของอนุภาคโดยวิธีตกตะกอนคือฟังก์ชันของค่าความน่าจะเป็นที่อนุภาคขนาดใดๆ ที่แขวนลอยอยู่ในสารแขวนลอยในส่วนที่อยู่เหนือจานรับน้ำหนักจะตกตะกอนลงมาถึงระดับผิวบนของจานรับน้ำหนัก ณ เวลา t ใดๆ ค่า kernel function สามารถคำนวณได้โดยอาศัยสมการที่ (4.5) และสมการที่ (4.6) โดย kernel function จะมีค่าอยู่ระหว่าง 0 ถึง 1 ดังแสดงในรูปที่ 4.1 และรูปที่ 4.2 แกนตั้งของกราฟแสดงค่าความน่าจะเป็นที่อนุภาคขนาดใดๆ จะตกตะกอนลงมาถึงระดับผิวบนของ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

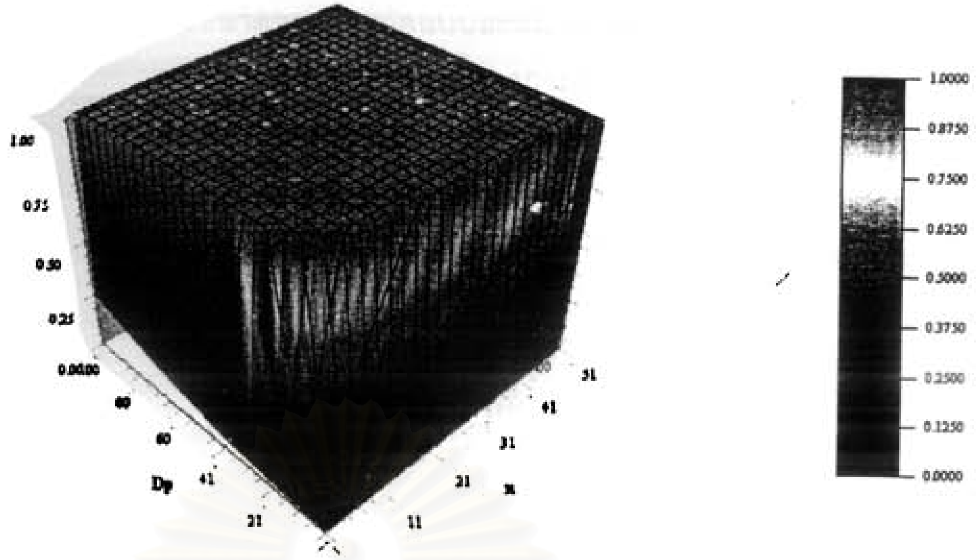
จานรับน้ำหนัก ณ เวลาใดๆ แกนนอน (n) แสดงจำนวนจุดของข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือที่นำมาใช้ในการประมวลผล (ค่ามาตรฐานของโปรแกรม คือ 50 จุด) แกนนอน (D_p) แสดงค่าขนาดของอนุภาคที่ต้องการหาฟังก์ชันการกระจายขนาด โดยแบ่งออกเป็น m ช่วง ตั้งแต่ขนาดอนุภาคเล็กสุดจนถึงขนาดอนุภาคใหญ่สุด (โดยปกติโปรแกรมกำหนดให้ m = 100, D_{pmin} = 0.1 μm, D_{pmax} = 100 μm) รูปที่ 4.1 และรูปที่ 4.2 แสดงให้เห็นว่า Kernel function เป็นค่าที่เปลี่ยนแปลงตามเวลา โดยเมื่อเวลาเพิ่มขึ้น (D_p ลดลง และ n เพิ่มขึ้น) ค่าความน่าจะเป็นที่อนุภาคขนาดเล็กๆ จะตกตะกอนลงมาถึงระดับผิวบนของจานรับน้ำหนักก็จะเพิ่มขึ้น (ค่าของ kernel function มีค่าเท่ากับ 1 มากขึ้น)

ในการนำระเบียบวิธีของทูมีมาใช้คำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดสำหรับข้อมูลที่ได้จากเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอน โปรแกรม SEDI-2Me จะเพิ่มชุดค่า kernel function ที่เกิดจากการประดิษฐ์ขึ้นอีก 1 ชุด เรียกว่า default kernel function โดยใช้สมมติฐานว่าอนุภาคที่มีขนาดใหญ่กว่าขนาดของอนุภาคที่กำหนด (default diameter) จะตกตะกอนหมดเมื่อสิ้นสุดการทดลอง โปรแกรม SEDI-2Me จะกำหนดให้ชุดข้อมูลของ default kernel function มีค่าเท่ากับ 1 สำหรับอนุภาคทุกขนาดที่ต้องการหาค่า ดังตัวอย่างของ kernel function ที่แสดงในรูปที่ 4.1 และ 4.2 ซึ่งเป็น kernel function ของการคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 โดยในการประมวลผลใช้จำนวนข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือจำนวน 50 ค่า และใช้ค่า D_{pmin} = 0.1, D_{pmax} = 100 และค่า m = 100 โดยปกติ Kernel function จะต้องมีจำนวนเท่ากับจำนวนข้อมูลที่ใช้ (50 ชุด) แต่จากรูปข้างต้นจะเห็นว่าค่า n ในการประมวลผลมีจำนวน 51 ค่า ค่า n (หรือชุดของ kernel function) ชุดที่ 51 คือ default kernel function ที่โปรแกรมสร้างขึ้น โดยมีค่าเท่ากับ 1 สำหรับอนุภาคทุกขนาด

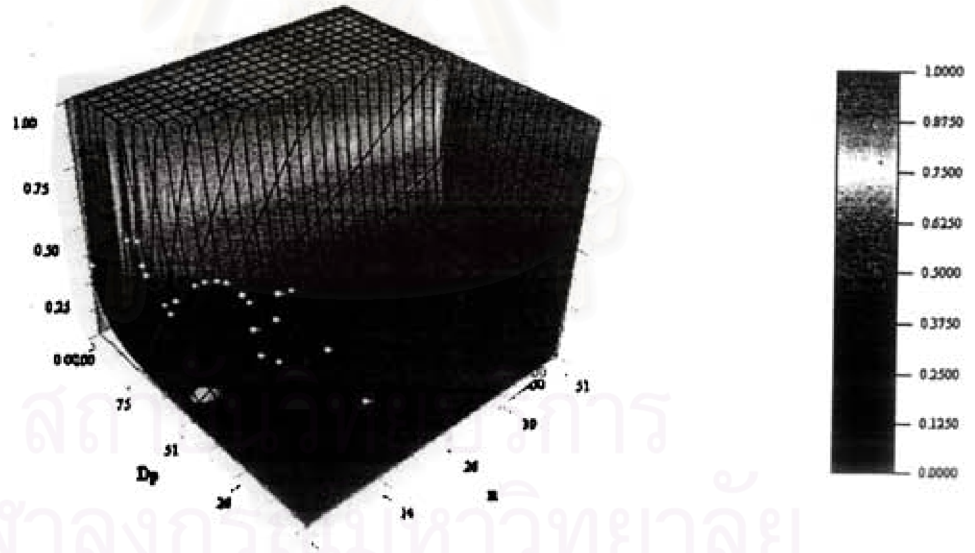
โปรแกรม SEDI-2Me กำหนดขนาดของอนุภาคสำหรับการประดิษฐ์ default kernel function ไว้ที่ 0.01 μm ซึ่งโดยทั่วไปการวัดขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนไม่สามารถวัดได้ เนื่องจากต้องใช้เวลานานมาก ยกตัวอย่างเช่น อนุภาคขนาด 0.01 μm ที่มี ρ_p = 2150 กิโลกรัม/ลูกบาศก์เมตร ที่ในตัวกลางน้ำ (ρ_f = 1000 กิโลกรัม/ลูกบาศก์เมตร, μ = 0.001 cp) ต้องใช้เวลา 14,788 วัน ในการตกตะกอนเป็นระยะทาง 8 cm (ในกรณีที่ไม่มีผลการกระทบจาก Brownian motion)

<u>**หมายเหตุ**</u>

ในการประดิษฐ์ kernel function ถ้าในการประมวลผลมีการกำหนด D_{pmin} ให้มีขนาดเล็กกว่า default diameter โปรแกรม SEDI-2Me จะกำหนดให้ D_{pmin} ที่กำหนดเป็นค่า default diameter แทน



- รูปที่ 4.1 kernel function ของเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่ได้จากการประมวลผลหาการกระจายขนาดแบบ Normal distribution ของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รูปที่ 4.2 kernel function ของเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่ได้จากการประมวลผลหาการกระจายขนาดแบบ Log-normal distribution ของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3

4.2 การคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสม (% oversize)

ในการคำนวณตามระเบียบวิธีของทูมี เมื่อสิ้นสุดการคำนวณระเบียบวิธีของทูมีจะให้ค่าฟังก์ชันการกระจายขนาดเป็นผลลัพธ์ของการคำนวณ ดังนั้นจึงต้องนำผลลัพธ์ที่ได้มาคำนวณหาการกระจายขนาดของอนุภาคต่อไป โดยการคำนวณค่าน้ำหนักเปอร์เซ็นต์ของอนุภาคที่มีขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางใหญ่กว่าขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของสโตกส์ ณ เวลา t ใดๆ ทำได้โดยใช้สมการที่ (2.12)

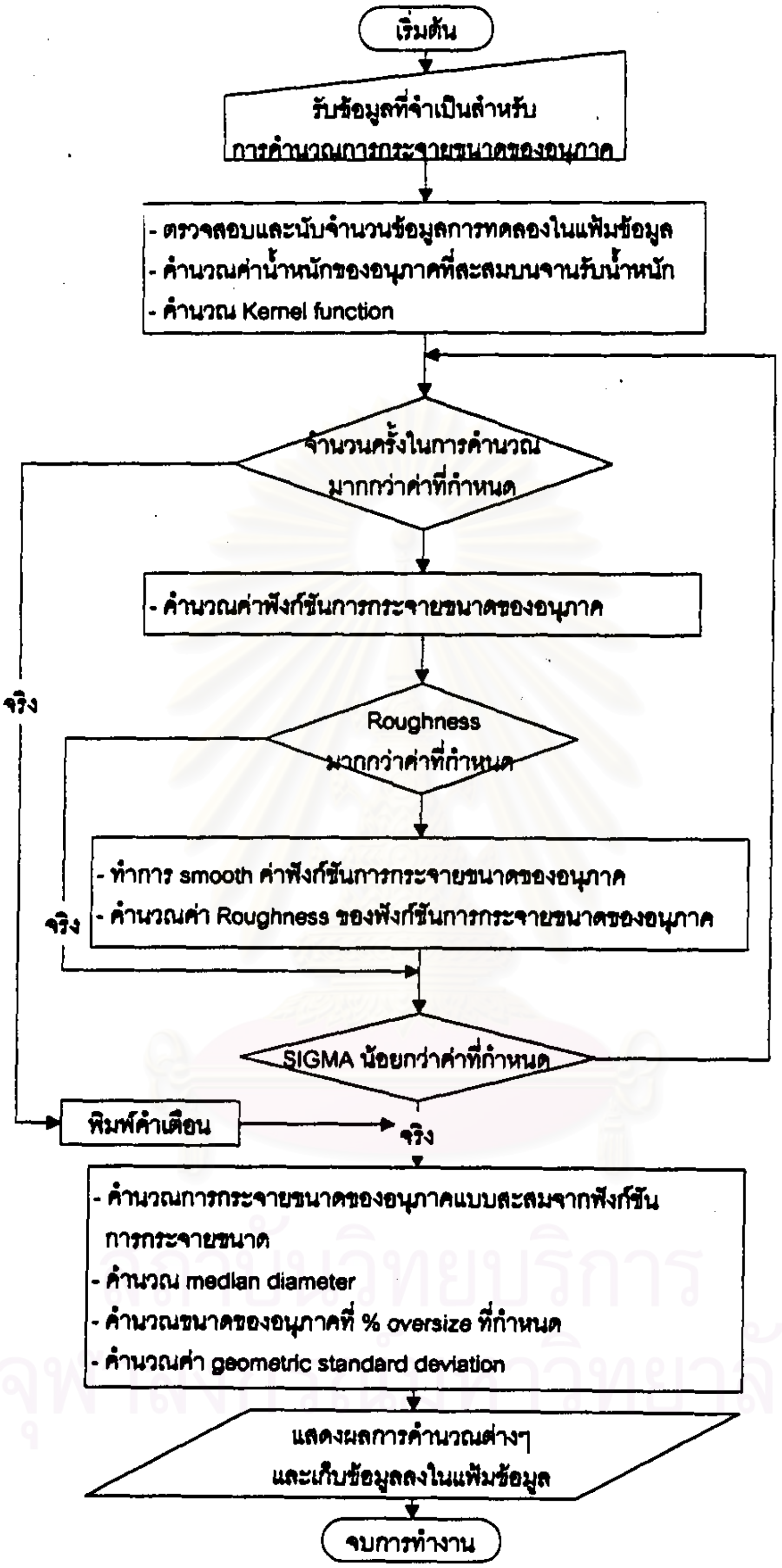
$$W(D_{pst}) = \int_{D_{pst}}^{D_{p\,max}} f(D_p)\,dD_p \qquad (2.12)$$

จะสามารถคำนวณหาค่าการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสม (% oversize) ได้โดยอาศัยการหาค่าอินทิกรัลของฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคในแต่ละช่วงโดยใช้กฎสี่เหลี่ยมคางหมู ค่าอินทิกรัลของช่วงที่ *j* คำนวณได้จาก

$$I_j = \left(D_{pj+1} - D_{pj}\right)\frac{f\left(D_{pj}\right) + f\left(D_{pj+1}\right)}{2} \qquad (4.13)$$

ขั้นตอนการประมวลผลของโปรแกรมคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคโดยอาศัย Twomey algorithm (โปรแกรม SEDI-2Me) สามารถแสดงขั้นตอนการประมวลผลอย่างง่ายได้ดังรูปที่ 4.1

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



รูปที่ 4.3 ผังแสดงขั้นตอนอย่างง่ายของการประมวลผลของโปรแกรมคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคโดยอาศัยระเบียบวิธีของทูมี

4.3 ขั้นตอนการทำงานของโปรแกรม

โปรแกรมคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคโดยอาศัยระเบียบวิธีของทูมี (โปรแกรม SEDI-2Me) เป็นโปรแกรมที่เขียนขึ้นโดยใช้ภาษาฟอร์แทรน (Compaq Visual Fortran V6.1) ซึ่งการทำงานของโปรแกรมจะแบ่งออกเป็น 3 ขั้นตอน ดังนี้คือ

- ขั้นตอนการใส่ข้อมูล (Input operation)
- ขั้นตอนการประมวลผล (Computation)
- ขั้นตอนการแสดงข้อมูล (Output operation)

แต่ละขั้นตอนมีรายละเอียดดังนี้

4.3.1 ขั้นตอนการใส่ข้อมูล (Input operation)

ข้อมูลที่ต้องป้อนให้กับโปรแกรมเพื่อใช้ในการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคมีดังต่อไปนี้

เกณฑ์ในการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาค

- ขนาดอนุภาคใหญ่สุด (ไมโครเมตร)
- ขนาดอนุภาคเล็กสุด (ไมโครเมตร)
- จำนวนของข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือ (n) ที่ใช้ในการประมวลผล
- จำนวนจุดของผลลัพธ์ที่ต้องการหาค่าการกระจายขนาดของอนุภาค (m)

ข้อมูลจำเพาะของการทดลอง

- ความหนาแน่นของอนุภาคตัวอย่าง (ρ_p, กิโลกรัม/ลูกบาศก์เมตร)
- ความหนาแน่นของตัวกลาง (ρ_f, กิโลกรัม/ลูกบาศก์เมตร)
- ความหนืดของตัวกลางที่ใช้ (μ, นิวตัน.วินาที/เมตร^2)
- ระยะทางในการตกตะกอน (เมตร) (ความลึกจากผิวตัวกลางถึงผิวบนจานรอง)
- น้ำหนักของอนุภาคส่วนที่ไม่ตกตะกอน (กรัม) เมื่อยุติการทดลอง (ดูรายละเอียดในหัวข้อ 6.3.4)

<u>หมายเหตุ</u>

1. โดยปกติโปรแกรมจะกำหนดค่าขนาดอนุภาคใหญ่สุดไว้ที่ 100 μm แต่สามารถเปลี่ยนค่าขนาดอนุภาคใหญ่สุดได้โดยสามารถเลือกได้ในช่วงระหว่าง 80 ถึง 200 μm
2. จากการทดลองแบบสุ่ม (*trial and error*) พบว่าการกำหนดค่าขนาดอนุภาคใหญ่สุดที่เหมาะสมควรมีค่าประมาณ 100 μm
3. ค่าขนาดของอนุภาคเล็กสุดสามารถเลือกได้ในช่วง 0.1 μm ถึง 5 μm โดยปกติโปรแกรมจะกำหนดค่าขนาดอนุภาคเล็กสุดไว้ที่ 0.1 μm
4. จำนวนของข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือที่ใช้ในการประมวลผล (n) สามารถเลือกได้ในช่วง 50 ถึง 1000 ค่า จากการทดลองแบบสุ่มจำนวนข้อมูลที่เหมาะสมควรใช้ประมาณ 50 ค่า เพราะการใช้จำนวนของข้อมูลที่วัดได้จากเครื่องมือมากกว่านี้จะไม่มีผลต่อค่าความถูกต้องของฟังก์ชันการกระจายขนาดที่คำนวณได้ แต่กลับจะก่อให้เกิดการแกว่งตัวของฟังก์ชันการกระจายขนาดได้
5. จำนวนจุดของผลลัพธ์ที่ต้องการหาค่าการกระจายขนาดของอนุภาค (m) สามารถเลือกได้ในช่วง 20 ถึง 200 ขึ้นอยู่กับความละเอียดที่ต้องการ โดยทั่วไปควรใช้ประมาณ 100 จุด เพราะการเพิ่มจำนวนจุดของผลลัพธ์ที่ต้องการหาค่าจะทำให้โปรแกรมต้องทำ iteration เพิ่มขึ้น ซึ่งอาจจะก่อให้เกิดการแกว่งตัวของฟังก์ชันการกระจายขนาดได้

4.3.2 ขั้นตอนการประมวลผล

เมื่อใส่ข้อมูลสำหรับระเบียบวิธีของทูมี และข้อมูลจำเพาะของการทดลองเรียบร้อยแล้ว ขั้นตอนต่อไปโปรแกรมจะเริ่มทำการประมวลผลเพื่อคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาค โดยมีขั้นตอนต่างๆ ดังต่อไปนี้

ขั้นตอนที่ 1 การตรวจสอบข้อมูลในแฟ้มข้อมูล

ขั้นตอนนี้โปรแกรมจะนับจำนวนข้อมูลการทดลองทั้งหมดที่เก็บอยู่ในแฟ้มข้อมูล พร้อมทั้งตรวจสอบหาความผิดพลาดที่อาจเกิดขึ้นกับข้อมูลในแฟ้มข้อมูล เพราะในการทำการทดลองจะทำ

การบันทึกข้อมูลน้ำหนักรวมที่ชั่งได้ตามเวลาแบบ on-line ซึ่งการบันทึกข้อมูลจำนวนมากๆ แบบ on-line อาจเกิดความผิดพลาดขึ้นระหว่างการบันทึกข้อมูลได้ ต่อจากนั้นโปรแกรมจะทำการคำนวณค่าน้ำหนักของอนุภาคที่สะสมอยู่บนจานรับน้ำหนัก โดยการลบค่าน้ำหนักรวมเมื่อเริ่มทำการเก็บข้อมูล (เวลา $t = 0$) ออกจากค่าน้ำหนักรวม ณ เวลา t ใดๆ หลังจากเริ่มเก็บข้อมูล

ขั้นตอนต่อไปโปรแกรมจะทำการแบ่งข้อมูลที่ได้จากการทดลองออกเป็น 2 ส่วน โดยอาศัยค่าน้ำหนักของอนุภาคที่ตกตะกอนลงบนจานรับน้ำหนักเป็นเกณฑ์ในการแบ่ง ต่อจากนั้นโปรแกรมจะทำการเลือกข้อมูลจำนวน $n/2$ ข้อมูลจากข้อมูลในแต่ละส่วนที่แบ่งในตอนต้นเพื่อนำมาใช้ในการประมวลผล (โดยปกติโปรแกรมกำหนดให้ $n = 50$)

<u>**หมายเหตุ**</u>

1. โดยปกติโปรแกรมจะใช้ค่าน้ำหนักที่ 95 เปอร์เซ็นต์ของน้ำหนักของอนุภาคทั้งหมดที่ตกตะกอนลงบนจานรับน้ำหนักเป็นเกณฑ์ในการแบ่งข้อมูลการทดลองออกเป็น 2 ส่วน แต่จากการทดลองแบบสุ่มพบว่าในการใช้โปรแกรม SEDI-2Me คำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคสำหรับอนุภาคที่มีลักษณะการกระจายขนาดแบบช่วงกว้างควรปรับค่าเกณฑ์น้ำหนักที่ใช้ให้มีค่าประมาณ 50 – 75 เปอร์เซ็นต์ของน้ำหนักของอนุภาคทั้งหมดที่ตกตะกอนลงบนจานรับน้ำหนัก โดยขึ้นอยู่กับลักษณะการกระจายขนาด

ขั้นตอนที่ 2 การคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค

ในการคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค โปรแกรมจะคำนวณค่าขนาดของอนุภาค m ขนาดที่ต้องการหาค่าการกระจายขนาดของอนุภาค จากขนาดอนุภาคใหญ่สุดและขนาดอนุภาคเล็กสุดที่กำหนดให้ ต่อจากนั้นโปรแกรมจะทำการคำนวณค่า Kernel functions จากสมการที่ (4.5) และสมการที่ (4.6) โดยค่าขนาดเส้นผ่านศูนย์กลางของสโตกส์ และค่าความเร็วในการตกตะกอนของสโตกส์ คำนวณได้จากสมการที่ (4.2) และสมการที่ (4.3) ตามลำดับ หลังจากได้ค่า kernel function แล้วโปรแกรมจะทำการประดิษฐ์ default kernel function ขึ้น

ขั้นตอนต่อไปโปรแกรมจะทำการคำนวณค่าผลลัพธ์เบื้องต้น จากฟังก์ชันเริ่มต้นที่กำหนดให้ (โปรแกรม SEDI-2Me กำหนดให้ฟังก์ชันเริ่มต้นมีค่าเท่ากับ 1) โดยอาศัยสมการที่ (4.7) และสมการที่ (4.8) แต่เนื่องจากค่าฟังก์ชันเริ่มต้นที่ใช้เป็นค่าที่ประดิษฐ์ขึ้น ดังนั้นค่าผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณในเบื้องต้นจะถูกนำไปทำการปรับเรียบโดยอาศัยสมการที่ (4.9) และสมการที่ (4.10) เพื่อลดการแกว่งของผลลัพธ์ที่คำนวณได้ โปรแกรมจะทำการปรับเรียบผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณ

จนกระทั่งค่า R^p/R^{p-2} ของผลลัพธ์มีค่ามากกว่า 0.98 โดยค่าความหยาบ (R) ของผลลัพธ์คำนวณได้จากสมการที่ (4.11) ส่วนสัญลักษณ์ตัวอักษร p แสดงถึงจำนวนครั้งที่ผลลัพธ์ผ่านการปรับเรียบ หลังจากทำการปรับเรียบผลลัพธ์จนค่า R^p/R^{p-2} ที่คำนวณได้มีค่ามากกว่าค่าที่กำหนดให้แล้ว ในการคำนวณครั้งถัดไปโปรแกรมจะข้ามขั้นตอนการปรับเรียบผลลัพธ์ไปโดยจะนำผลลัพธ์ที่คำนวณได้มาใช้เป็นค่าเริ่มต้นในการคำนวณผลลัพธ์ชุดถัดไปโดยตรง

โปรแกรม SEDI-2Me จะหยุดการคำนวณหาฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคเมื่อ SIGMA มีค่าน้อยกว่าค่าที่กำหนด (ค่ามาตรฐานของโปรแกรม คือ 1) หรือเมื่อจำนวนครั้งในการคำนวณผลลัพธ์มีค่ามากกว่าจำนวนครั้งสูงสุดที่กำหนดให้ (ค่ามาตรฐานของโปรแกรม 30,000 ครั้ง) โดยค่า SIGMA สามารถคำนวณได้จากสมการที่ (4.12)

ขั้นตอนที่ 3 การคำนวณค่าการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสม

ค่าการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสมคำนวณได้โดยการหาค่าอินทิกรัลของฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคที่คำนวณได้จากขั้นตอนที่ 2 เนื่องจากในการคำนวณฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค โปรแกรมจะแบ่งฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคออกเป็นช่วงๆ จำนวน m-1 ช่วง ดังนั้นค่าการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสมจึงสามารถหาได้จากการหาค่าอินทิกรัลในแต่ละช่วงของฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาค โดยใช้สมการที่ (4.13)

หลังจากโปรแกรมทำการคำนวณค่าการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสมเสร็จสิ้น โปรแกรมจะทำการคำนวณค่าเส้นผ่านศูนย์กลางมัธยฐาน (D_{p50}) และค่าขนาดของอนุภาคที่ % oversize ที่กำหนด โดยใช้ระเบียบวิธีการประมาณค่าในช่วง โดยอาศัยสมการที่ (3.22) พร้อมทั้งคำนวณค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของขนาดอนุภาค

4.3.3 ขั้นตอนการแสดงข้อมูล (Output operation)

เมื่อขั้นตอนการประมวลผลเสร็จสิ้นจะได้ข้อมูลทั้งหมด ซึ่งประกอบด้วยข้อมูลการกระจายขนาดของอนุภาคแบบสะสมและแบบสัมพัทธ์ สำหรับการแสดงผลโดยใช้สเกลปกติ และสำหรับการแสดงผลโดยใช้สเกลล็อก พร้อมทั้งค่าเส้นผ่านศูนย์กลางมัธยฐาน, ข้อมูลขนาดของอนุภาคที่ % oversize ที่กำหนด และเบี่ยงเบนมาตรฐานของขนาดอนุภาค

เมื่อนำข้อมูลการกระจายขนาดของอนุภาคมาพิจารณาหรือเขียนเป็นกราฟโดยใช้โปรแกรม EXCEL ก็จะได้กราฟการกระจายขนาดของอนุภาค ทั้งกราฟแบบสะสมและกราฟแบบสัมพัทธ์ ซึ่งมีประโยชน์อย่างมากในการแสดงผลการกระจายขนาดของอนุภาคตัวอย่าง นอกจากนี้ยังสามารถ

บันทึกผลการคำนวณทั้งหมดลงในแฟ้มข้อมูลเพื่อเพิ่มความสะดวกในการตรวจสอบ และการนำข้อมูลมาใช้งานภายหลัง

ในการนำข้อมูลที่ได้จากการประมวลผลมาเขียนเป็นกราฟด้วยโปรแกรม EXCEL จะกำหนดให้แกนนอนแสดงค่าขนาดของอนุภาค ส่วนแกนตั้งเป็นค่าการกระจายขนาด สำหรับในกรณีการแสดงผลโดยใช้สเกลล็อกจะต้องสั่งให้โปรแกรม EXCEL กำหนดให้แกนนอนเป็นสเกลแบบล็อก

4.4 <u>การทดสอบความถูกต้องของโปรแกรม และผลที่ได้รับ</u>

การทดสอบความถูกต้องของโปรแกรมจะทำโดยการเปรียบเทียบค่าการกระจายขนาดของอนุภาคที่ได้จากการประมวลผลโดยใช้โปรแกรม SEDI-2Me กับข้อมูลการทดลองวัดขนาดของอนุภาคมาตรฐานหรือข้อมูลการกระจายขนาดจากเอกสารอ้างอิง ผลการทดสอบความถูกต้องของโปรแกรมในการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคจะนำเสนอในบทที่ 6 ในหัวข้อนี้จะแสดงเฉพาะผลของ default kernel function ที่มีต่อลักษณะการกระจายขนาดที่คำนวณได้

4.4.1 อิทธิพลของ default kernel function ที่เกิดจากการประดิษฐ์ต่อการคำนวณลักษณะการกระจายขนาด

ในการแสดงผลของ default kernel function ที่มีต่อการคำนวณการกระจายขนาดของอนุภาคสำหรับโปรแกรมประมวลผล SEDI-2Me จะแสดงผลการเปรียบเทียบระหว่างค่าการกระจายขนาดของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 ที่ได้จากการวิเคราะห์ผลโดยใช้โปรแกรมประมวลผล SEDI-2Me ที่ใช้ *default kernel function (ดูรายละเอียดในหัวข้อ 6.5.3.1) กับค่าการกระจายขนาด*ที่ได้จากการวิเคราะห์ผลโดยใช้โปรแกรมประมวลผล SEDI-2Me โดยไม่ใช้ default kernel function (เรียกว่า SEDI-2Me (Un))

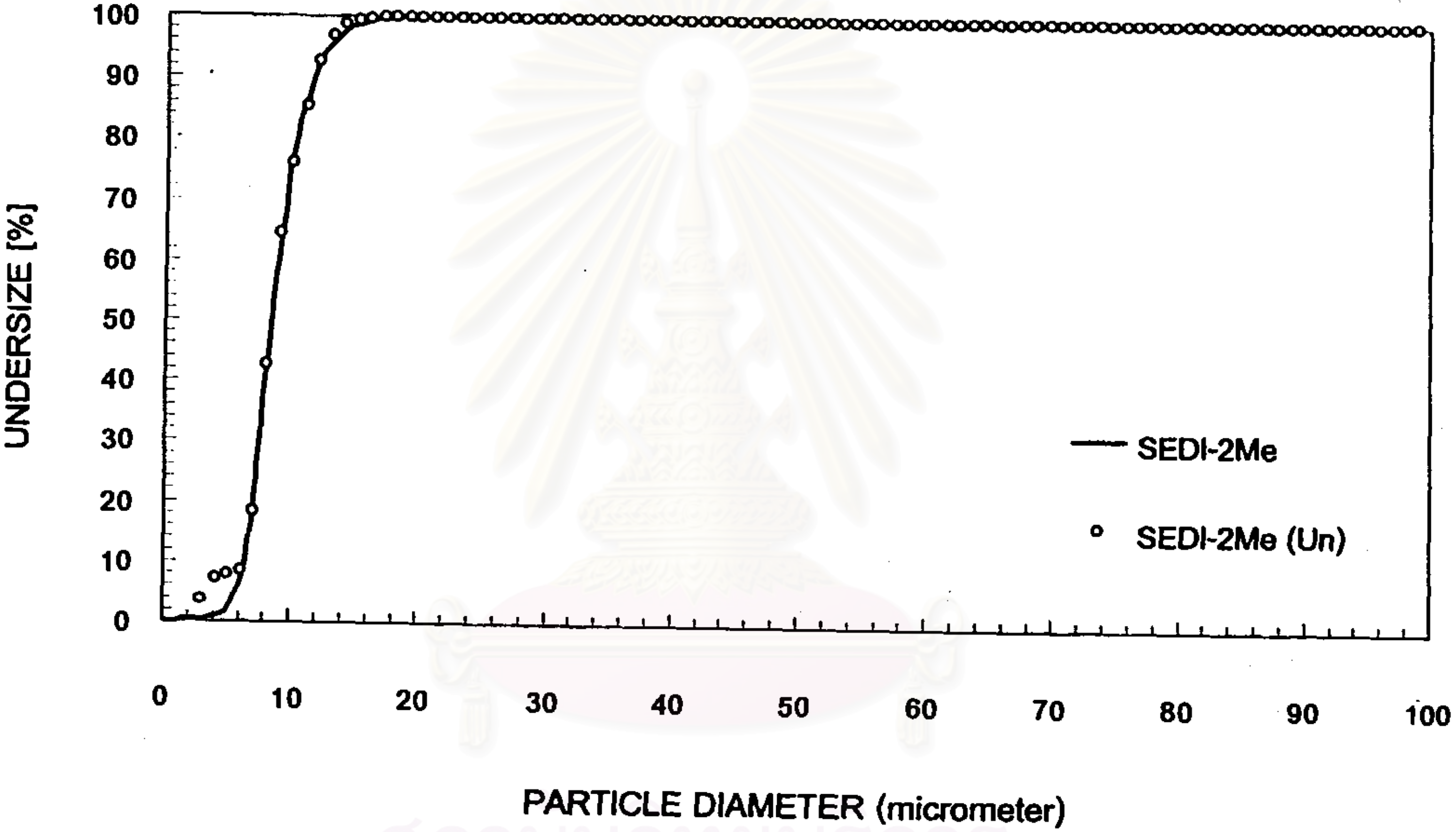
ในการประมวลผล โปรแกรม SEDI-2Me จะกำหนดให้ $D_{pmin} = 0.1$, $D_{pmax} = 100$, $n = 50$, $m = 100$ อนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 เป็นอนุภาคที่มีลักษณะการกระจายตัวแบบแคบ ลักษณะการกระจายขนาดที่แท้จริงของอนุภาคชนิดนี้สามารถดูรายละเอียดได้ในหัวข้อที่ 6.5.3.1

ในการวิเคราะห์การกระจายขนาดของอนุภาคจากข้อมูลการตกตะกอนของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 ที่วัดได้จากเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีตกตะกอน (กราฟการตกตะกอนแสดงในรูปที่ 3.6) พบว่าการกระจายขนาดแบบสะสมที่ได้จากการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SEDI-2Me ที่ไม่มีการเพิ่ม default kernel function จะเกิดการเบี่ยงเบนจากการกระจายขนาดแบบสะสมที่ได้จากการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SEDI-2Me ที่ใช้ default kernel function ในช่วงอนุภาคขนาดเล็กๆ ดังแสดงในรูปที่ 4.4 และ 4.6

รูปที่ 4.5 และ 4.7 แสดงให้เห็นว่าฟังก์ชันการกระจายขนาดของอนุภาคที่ได้จากการคำนวณโดยใช้โปรแกรม SEDI-2Me ที่ไม่มีการเพิ่ม *default kernel function* จะเกิดการเบี่ยงเบนสำหรับอนุภาคขนาดเล็กๆ

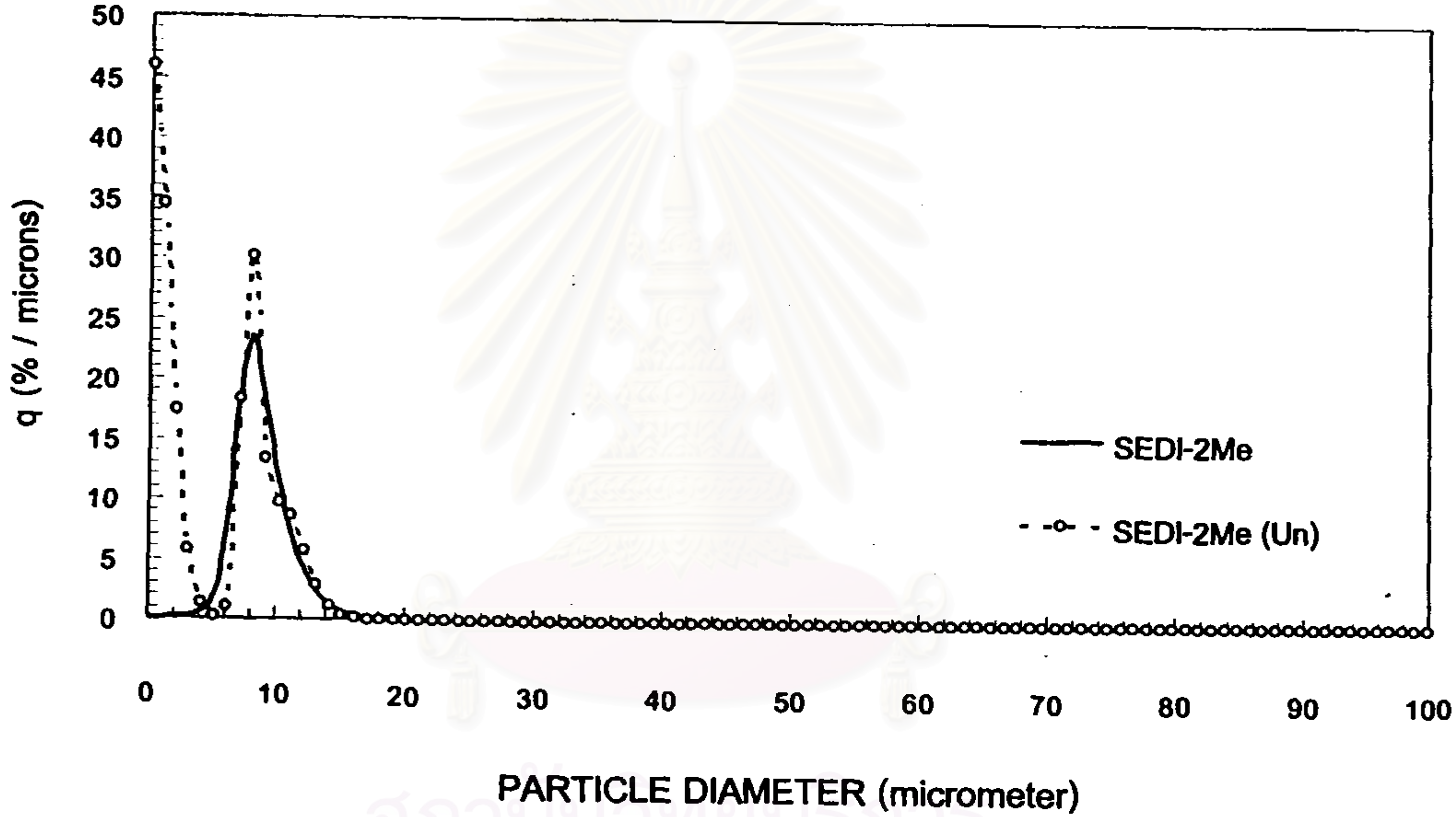
รูปที่ 4.8 และ 4.9 แสดง kernel function ที่ไม่มีการเพิ่ม default kernel function ของเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่ได้จากการประมวลหาการกระจายขนาดของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



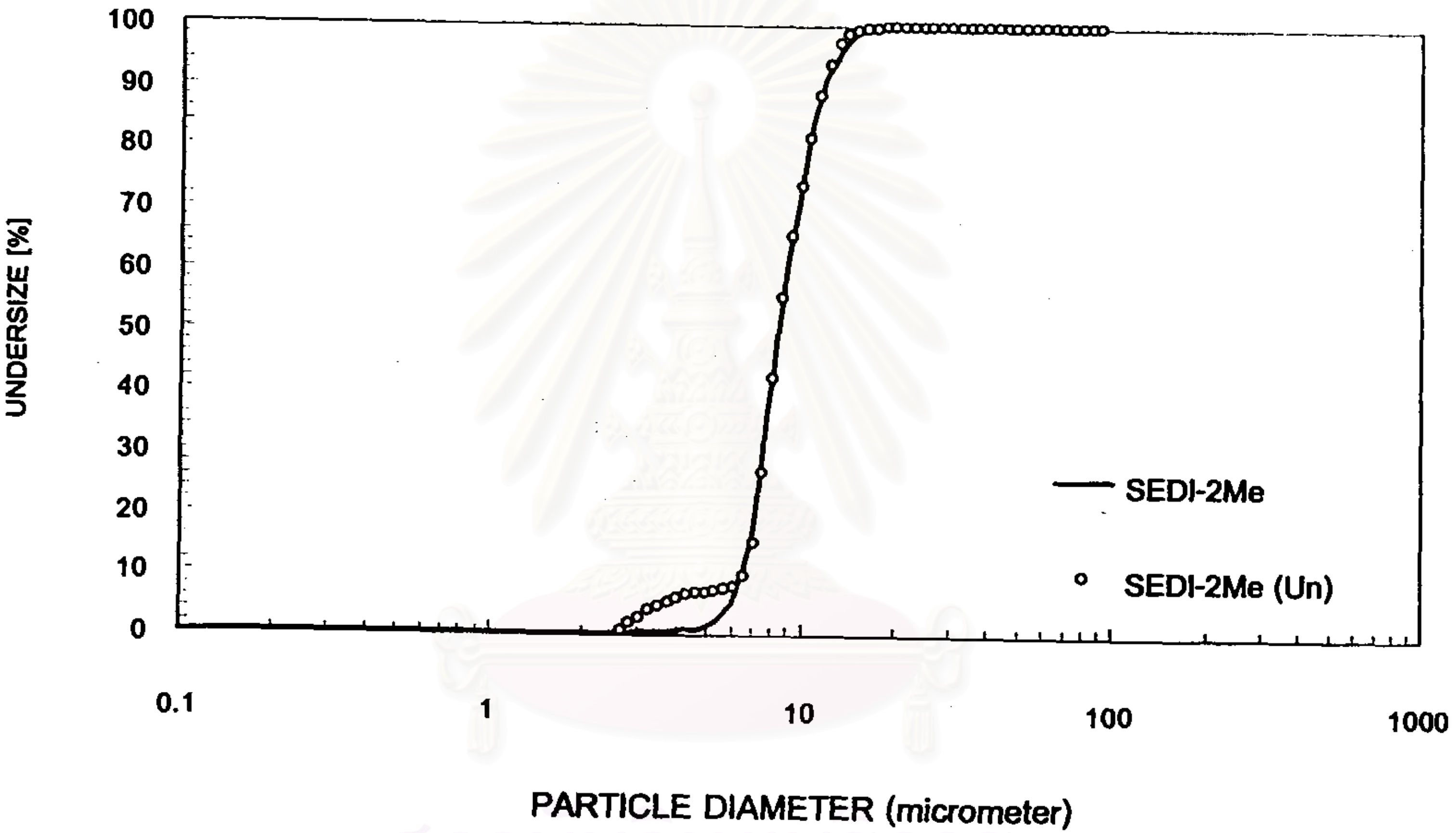
<u>รูปที่ 4.4</u> ผลการเปรียบเทียบระหว่างค่าการกระจายขนาดแบบสะสมที่ได้จากการประมวลผลโดยโปรแกรม SEDI-2Me ที่ใช้และไม่ใช้ default kernel function สำหรับอนุภาค JIS TEST POWDER II,No.3 ในกรณีที่ใช้สเกลปกติ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



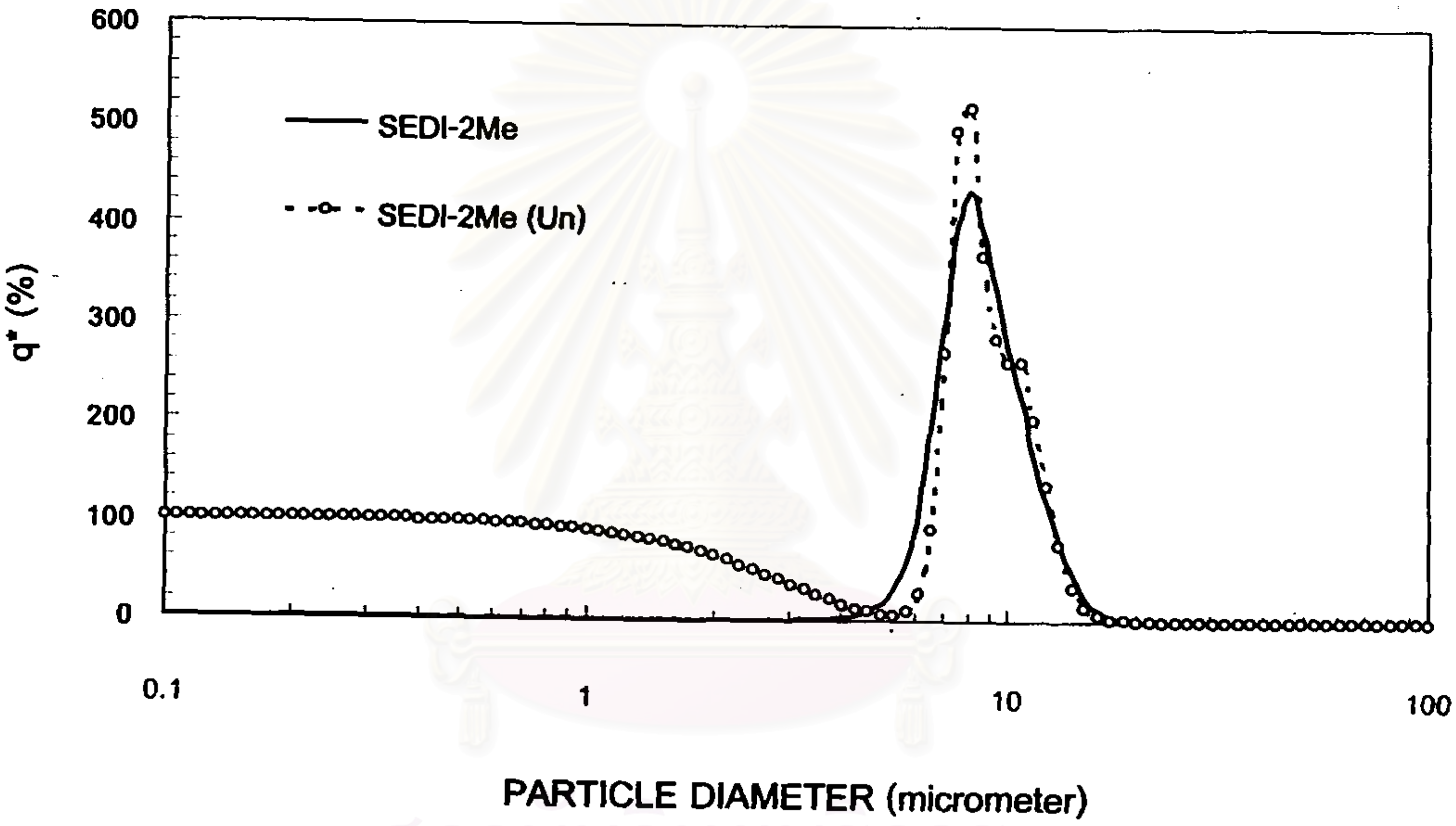
รูปที่ 4.5 ผลการเปรียบเทียบระหว่างฟังก์ชันการกระจายขนาดที่ได้จากการประมวลผลโดยโปรแกรม SEDI-2Me ที่ใช้และไม่ใช้ default kernel function สำหรับอนุภาค JIS TEST POWDER II,No.3 ในกรณีที่ใช้สเกลปกติ

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



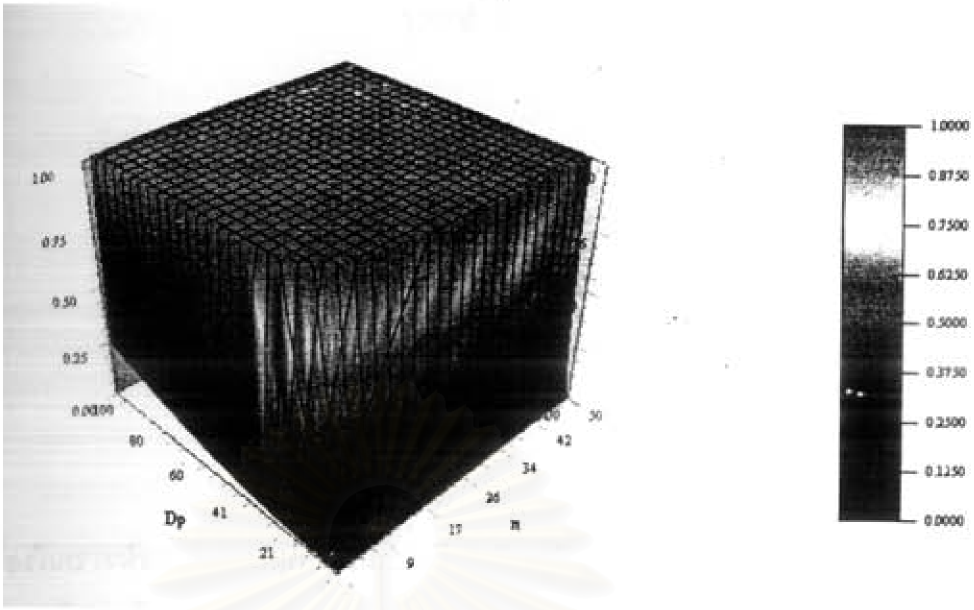
สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

<u>รูปที่ 4.6</u> ผลการเปรียบเทียบระหว่างค่าการกระจายขนาดแบบสะสมที่ได้จากการประมวลผลโดยโปรแกรม SEDI-2Me ที่ใช้และไม่ใช้ default kernel function สำหรับอนุภาค JIS TEST POWDER II,No.3 ในกรณีที่ใช้สเกลล็อก

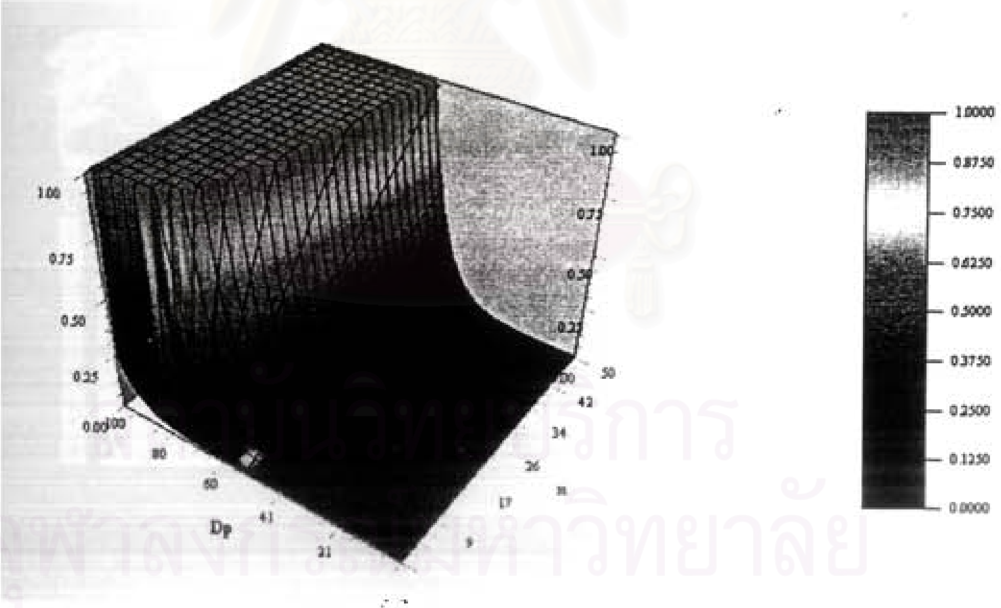


<u>รูปที่ 4.7</u> ผลการเปรียบเทียบระหว่างฟังก์ชันการกระจายขนาดที่ได้จากการประมวลผลโดยโปรแกรม SEDI-2Me ที่ใช้และไม่ใช้ default kernel function สำหรับอนุภาค JIS TEST POWDER II,No.3 ในกรณีที่ใช้สเกลล็อก

สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



<u>รูปที่ 4.8</u> kernel function ของเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่ได้จากการประมวลผลหาการกระจายขนาดแบบ Normal distribution ของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 โดยไม่ใช้ default kernel function



สถาบันวิทยบริการ
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

<u>รูปที่ 4.9</u> kernel function ของเครื่องวิเคราะห์ขนาดของอนุภาคโดยวิธีการตกตะกอนที่ได้จากการประมวลผลหาการกระจายขนาดแบบ Log-normal distribution ของอนุภาค JIS TEST POWDER II, No.3 โดยไม่ใช้ default kernel function