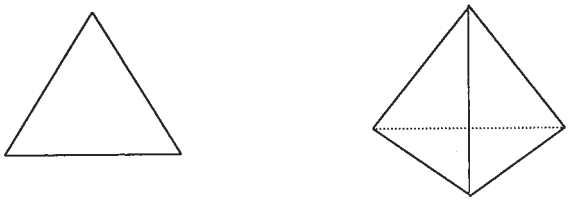
การหาสภาวะที่ดีที่สุดของวิธีวิเคราะห์ โดยใช้วิธี Simplex Optimization

เรียบเรียงโดย
ปัทมา นพรัตน์

ในการหาสภาวะที่ดีที่สุดของวิธีวิเคราะห์ที่มีหลายตัวแปรมักใช้เวลานาน และมีความยุ่งยากซับซ้อน การนำเทคนิค simplex optimization มาใช้จึงเป็นทางเลือกทางหนึ่งที่ทำให้สามารถหาสภาวะที่ดีที่สุดของวิธีวิเคราะห์ซึ่งมีหลายตัวแปรได้ ซึ่งเทคนิคดังกล่าวได้ถูกนำมาใช้กันอย่างแพร่หลายในด้านเคมีและวิศวกรรมเคมี

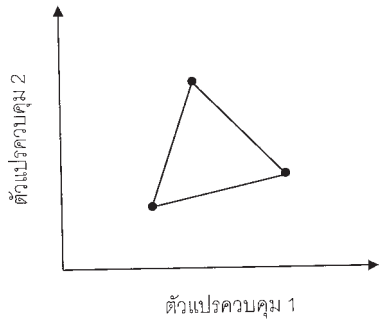
Simplex optimization เป็นวิธีที่เริ่มต้นการทดลองจำนวน k+1 การทดลอง โดยที่ k คือจำนวนตัวแปรที่ควบคุม ถ้ามี 2 ตัวแปร simplex เริ่มต้นจะถูกออกแบบให้มี 3 การทดลอง และถ้ามี 3 ตัวแปร simplex เริ่มต้นจะถูกออกแบบให้มี 4 การทดลอง เป็นต้น รูปที่เกิดจากการเชื่อมต่อจุดของการทดลองจำนวน k+1 เรียกว่า “simplex” มุมของรูปเรียกว่า “จุดตัดของเส้น (vertices)” รูปร่างของ simplex ที่เกิดจาก 2 ตัวแปร และ 3 ตัวแปร คือ สามเหลี่ยม (triangle) และเททระฮีดรอน (tetrahedron) ตามลำดับ



สามเหลี่ยม
เกิดจาก 2 ตัวแปร

เททระฮีดรอน
เกิดจาก 3 ตัวแปร

รูปที่ 1. แสดงรูปร่างของ simplex ที่เกิดจากตัวแปร 2 ตัวแปร และ 3 ตัวแปร



รูปที่ 2. แสดง simplex ที่มาจาก 3 การทดลอง ที่ตัวแปรที่ควบคุม 2 ตัวแปรมีค่าแตกต่างกัน

หลังจากได้การทดลองเริ่มต้นแล้ว กระบวนการ simplex ก็จะดำเนินการอย่างต่อเนื่อง ด้วยการสร้างการทดลองใหม่ขึ้นมาเรื่อยๆ จนกระทั่ง simplex ค้นพบการทดลองที่ตัวแปรควบคุมให้ค่าที่ดีที่สุด นั่นคือกระบวนการหาสภาวะที่ดีที่สุด (optimization process) จะสิ้นสุดลงเมื่อบรรลุวัตถุประสงค์ของการหาสภาวะที่ดีที่สุด หรือค่าที่วัดได้ (response) ไม่สามารถจะเพิ่มขึ้นต่อไปได้อีก

ขั้นตอนการดำเนินการของวิธี simplex optimization มีกฎดังนี้

กฎข้อที่ 1 : สร้าง simplex เริ่มต้นด้วยการทดลองจำนวนเท่ากับจำนวนตัวแปรที่ควบคุมบวกกับหนึ่ง และวัดค่าที่วัดได้ของแต่ละการทดลอง

กฎข้อที่ 2 : ตัดการทดลองที่ให้ค่าที่วัดได้ต่ำที่สุดออก แล้วทำการทดลองขึ้นใหม่แทนการทดลองเดิมที่ให้ค่าต่ำที่สุด โดยคำนวณจากการสะท้อน (reflect) กับการทดลองที่ให้ค่าต่ำที่สุดในทิศทางตรงข้ามกับด้านที่การทดลองเหลืออยู่

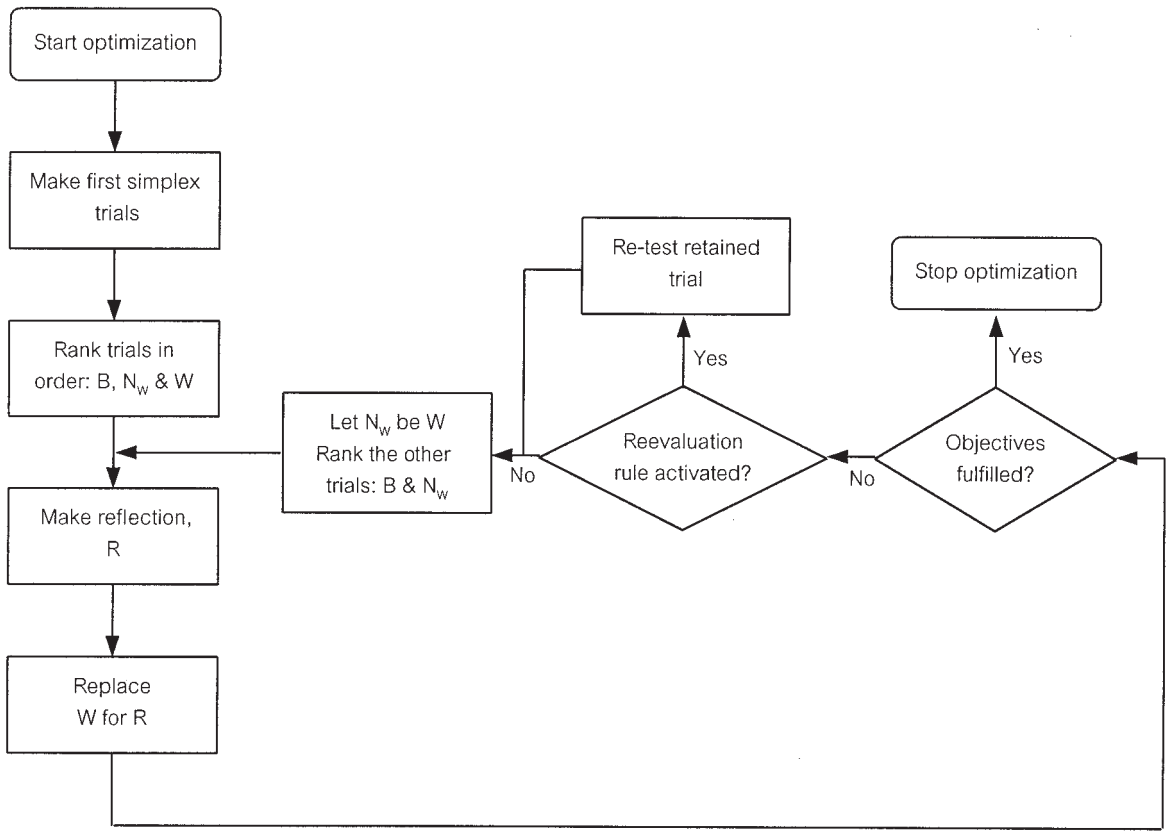
กฎข้อที่ 3 : ถ้าการทดลองที่ทำขึ้นใหม่ให้ค่าที่ต่ำที่สุดใน simplex ใหม่ ตามกฎข้อที่ 2 จะทำการทดลอง

ใหม่โดยการสะท้อนกับการทดลองที่ให้ค่าต่ำที่สุดนี้ในทิศทางตรงข้าม ทำให้ได้การทดลองเดิมที่ให้ค่าต่ำที่สุดใน simplex เดิม ดังนั้นถ้าไม่มีกฎข้อที่ 3 จะทำให้เกิดการสะท้อนกลับไปกลับมาระหว่างการทดลองทั้งสอง กฎข้อที่ 3 จึงให้ตัดการทดลองที่ให้ค่าต่ำสุดเป็นอันดับสอง แล้วสะท้อนกับการทดลองนี้ในทิศทางตรงข้าม ทำให้ได้การทดลองใหม่ขึ้นมา

กฎข้อที่ 4 : ถ้าการทดลองใดเป็นส่วนหนึ่งของ simplex ติดต่อกันมากกว่า 3 ครั้ง และใน simplex 3 ครั้งสุดท้ายให้ค่าที่สูงที่สุด จะถือว่าการทดลองนั้นเป็นการทดลองที่มีสภาวะที่ดีที่สุด (optimum value) ของขนาด simplex ที่กำหนด ถ้าต้องการให้ขนาดของ simplex เล็กลง จะต้องทำการทดลองสร้าง simplex ขึ้นใหม่ แล้วดำเนินการต่อไปเป็นวัฏจักรไปเรื่อยๆ

ขั้นตอนของวิธี simplex optimization สามารถเขียนเป็นแผนภูมิ (flow chart) แสดงขั้นตอนการดำเนินการดังแสดงในรูปที่ 3

ดำเนินการ ดังแสดงในรูปที่ 3



รูปที่ 3. แสดงแผนภูมิขั้นตอนการดำเนินการของวิธี simplex optimization

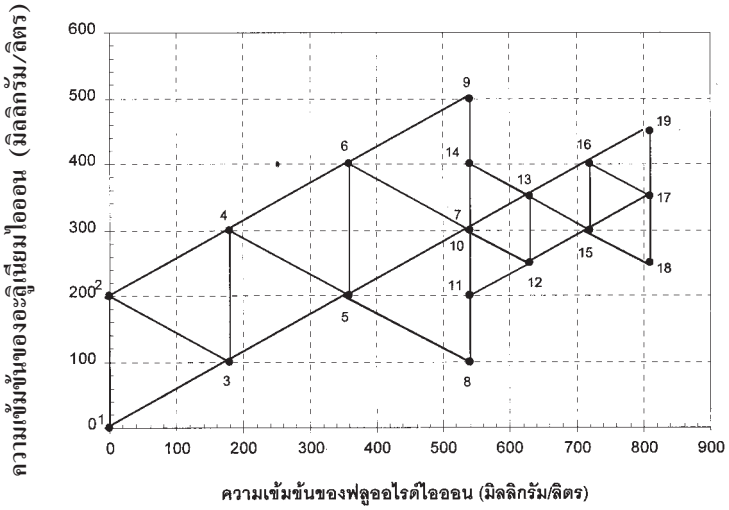
W = worst trial, N_W = next-to-the worst trial, B = best trial.

ตัวอย่างการใช้วิธี simplex optimization ในการหาอัตราส่วนที่เหมาะสมระหว่างความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออนและฟลูออไรด์ไอออนสำหรับวิธีวิเคราะห์เซอร์โคเนียมด้วยเครื่องเฟลมอะตอมมิกแอบซอร์พชันสเปกโทรโฟโตมิเตอร์ เนื่องจากการเติมอะลูมิเนียมไอออนและฟลูออไรด์ไอออนลงไปในสารละลายจะทำให้วิธีวิเคราะห์เซอร์โคเนียมมีประสิทธิภาพมากขึ้น แต่ทั้งนี้ก็ยังไม่ทราบแน่ชัดว่าวิธีวิเคราะห์เซอร์โคเนียมนั้นควรเติมอะลูมิเนียมไอออน หรือฟลูออไรด์ไอออนเพียงตัวใดตัวหนึ่งหรือเติมทั้งสองสารด้วยอัตราส่วนเท่าใดจึงจะเหมาะสม

ดังนั้นจึงทำการศึกษาหาอัตราส่วนที่เหมาะสมระหว่างสารทั้งสอง โดยวิธี simplex optimization ดังแสดงในตารางที่ 1 และรูปที่ 4 โดยเริ่มต้นทำการทดลองครั้งที่ 1 ที่ความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออน และฟลูออไรด์ไอออนเท่าไรก็ได้ ซึ่งผู้ทำการทดลองกำหนดโดยใช้ข้อมูลจากเอกสารอ้างอิงหรือจากประสบการณ์ การทดลองครั้งที่ 2 และ 3 กำหนดความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออน และฟลูออไรด์ไอออนให้สัมพันธ์กับการทดลองครั้งที่ 1 โดยเมื่อลากจุดเชื่อมต่อของทั้งสามการทดลองแล้วต้องได้สามเหลี่ยมด้านเท่า จากนั้นดำเนินการตามขั้นตอนของวิธี simplex optimization จนกระทั่งได้สภาวะที่ดีที่สุด หรือค่าที่วัดได้ไม่สามารถจะเพิ่มขึ้นต่อไปได้อีก

ตารางที่ 1. แสดง simplex ที่เกิดจากการทดลองที่มีอัตราส่วนระหว่างความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออนและฟลูออไรด์ไอออนที่แตกต่างกัน ของวิธีวิเคราะห์เซอร์โคเนียมด้วยเครื่องเฟลมอะตอมมิกแอบซอร์พชัน สเปกโทรโฟโตมิเตอร์

ครั้งที่	simplex	ความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออน (มิลลิกรัม/ลิตร)	ความเข้มข้นของฟลูออไรด์ไอออน (มิลลิกรัม/ลิตร)	ค่าการดูดกลืนแสงของเซอร์โคเนียม (y)	หมายเหตุ
1		0	0	0.0743	
2		200	0	0.1174	
3	(1,2,3)	100	180	0.1279	Original simplex
4	(2,3,4)	300	180	0.1422	
5	(3,4,5)	200	360	0.1525	
6	(4,5,6)	400	360	0.1485	
7	(5,6,7)	300	540	0.1619	
8	(5,7,8)	100	540	0.1493	
9	(6,7,9)	500	540	0.1439	Reject second worst
10	(6,9,10)	300	540	0.1619	Repeat y(7)
11		200	540	0.1535	
12	(10,11,12)	250	630	0.1570	New simplex
13	(10,12,13)	350	630	0.1676	
14	(10,13,14)	400	540	0.1598	
15	(12,13,15)	300	720	0.1703	Reject second worst
16	(13,15,16)	400	720	0.1686	
17	(15,16,17)	350	810	0.1705	
18	(15,17,18)	250	810	0.1614	
19	(16,17,19)	450	810	0.1701	Reject second worst



รูปที่ 4. แสดงการเคลื่อนที่ของ simplex จากการทดลองหาอัตราส่วนระหว่างความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออนและฟลูออไรด์ไอออนที่แตกต่างกัน ของวิธีวิเคราะห์เซอร์โคเนียมด้วยเครื่องเฟลมอะตอมมิกแอบซอร์พชันสเปกโทรโฟโตมิเตอร์

วิธีการคำนวณค่าตัวแปรของการทดลองใหม่แทนการทดลองเดิมที่ให้ค่าต่ำที่สุด ดังแสดงในตารางที่ 2 ข้อ (1)-(5) ซึ่งมีตัวแปรที่ควบคุม 2 ตัวแปร คือความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออน และฟลูออไรด์ไอออน เริ่มต้นทำการทดลองจำนวน 3 การทดลอง ได้แก่ การทดลองที่ 1, 2 และ 3 พบว่าการทดลองที่ 1 ให้ค่าต่ำที่สุด ดังนั้นการทดลองนี้จะถูกแทนที่ด้วยการทดลองใหม่ ขั้นตอนการคำนวณค่าตัวแปรของการทดลองใหม่เป็นดังนี้

(1) คำนวณผลรวมของค่าตัวแปรแต่ละตัว โดยไม่รวมการทดลองที่ให้ค่าต่ำที่สุด

(2) นำผลรวมของแต่ละตัวแปรที่ได้มาหารด้วยจำนวนตัวแปรที่ควบคุม (k = 2)

(3) แสดงค่าของตัวแปรที่การทดลองให้ค่าต่ำที่สุด

(4) คำนวณค่าการเคลื่อนที่ของตัวแปรของการทดลองใหม่ซึ่งมีค่าเท่ากับ (2) - (3)

(5) คำนวณค่าตัวแปรของการทดลองใหม่ซึ่งมีค่าเท่ากับ (2) + (4)

ตารางที่ 2. แสดงตัวอย่างวิธีการคำนวณค่าตัวแปรของการทดลองใหม่แทนการทดลองเดิมที่ให้ค่าต่ำที่สุด

	ตัวแปร		
	ความเข้มข้นของอะลูมิเนียมไอออน (มิลลิกรัม/ลิตร)	ความเข้มข้นของฟลูออไรด์ไอออน (มิลลิกรัม/ลิตร)	ค่าที่วัดได้
การทดลองที่ 1 (ตัดทิ้ง)	0	0	0.0743
การทดลองที่ 2	200	0	0.1174
การทดลองที่ 3	100	180	0.1279
(1) คำนวณผลรวมของค่าตัวแปรแต่ละตัวโดยไม่รวมการทดลองที่ให้ค่าต่ำที่สุด	300	180	
(2) นำผลรวมของแต่ละตัวแปรที่ได้มาหารด้วยจำนวนตัวแปรที่ควบคุม (k = 2)	150	90	
(3) แสดงค่าของตัวแปรที่การทดลองให้ค่าต่ำที่สุด (การทดลองที่ 1)	0	0	
(4) คำนวณค่าการเคลื่อนที่ของตัวแปรของการทดลองใหม่ ซึ่งมีค่าเท่ากับ (2) - (3)	150	90	
(5) คำนวณค่าตัวแปรของการทดลองใหม่ซึ่งมีค่าเท่ากับ (2) + (4) (การทดลองที่ 4)	300	180	

(อ่านต่อหน้า 14)