รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ การหาค่าเหมาะสมในการออกแบบแผนแบบทดลองสำหรับการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์

คณะผู้วิจัย

1. ผศ.ดร. อนามัย นาอุดม สังกัด ภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ ม.นเรศวร
2. ผศ.ดร. จรัสศรี รุ่งรัตนาอุบล สังกัด ภาควิชาวิทยาการคอมพิวเตอร์และเทคโนโลยีสารสนเทศ คณะวิทยาศาสตร์ ม.นเรศวร

สนับสนุนโดย
งบประมาณแผ่นดิน มหาวิทยาลัยนเรศวร
ปีงบประมาณ 2561

สารบัญ

บทคัดย่อ

ปัจจุบันการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ (Computer simulated experiments: CSE) ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในการประยุกต์งานด้านต่าง ๆ ได้แก่ วิศวกรรมศาสตร์ หรือวิทยาศาสตร์ประยุกต์ เพื่อทำการศึกษากระบวนการที่มีความซับซ้อนซึ่งไม่สามารถทำการทดลองทางกายภาพได้ ดังนั้นความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรเข้าและตัวแปรตอบสนองในระบบที่ซับซ้อนเหล่านี้สามารถสำรวจได้โดยใช้ตัวแบบทางสถิติ โดยทั่วไป ตัวแปรตอบสนองที่ได้จากกระบวนการทำงานของ CSE มีลักษณะเป็นตัวกำหนดและใช้เวลานานในการประมวลผลเพื่อให้ได้ค่าตัวแปรตอบสนองแต่ละค่า ดังนั้นการออกแบบการทดลองสำหรับ CSE จึงมีบทบาทสำคัญอย่างยิ่งเพื่อให้ได้ค่าตัวแปรผลตอบสนองเพื่อนำไปพัฒนาตัวแบบเพื่อการพยากรณ์เชิงสถิติเพื่อใช้ในการพยากรณ์ต่อไป แผนแบบ Latin hyper cube design (LHD) เป็นหนึ่งในคลาสการออกแบบที่ได้รับความนิยมสำหรับ CSE นอกจากนี้แผนแบบ LHD ที่มีคุณสมบัติการเติมเต็มปริภูมิหรือคุณสมบัติเชิงตั้งฉากมักจะถูกนำเสนอเพื่อใช้สำหรับ CSE โครงการวิจัยนี้มุ่งศึกษาการคุณสมบัติของแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยพิจารณาเกณฑ์ ϕ_p โดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้นในการการค้นหาแผนแบบทดลองที่เหมาะสมที่สุด จากนั้นนำแผนการทดลองที่สร้างได้ไปพยากรณ์โดยใช้ตัวแบบที่แตกต่างกัน 3 ตัวแบบ ประกอบด้วย ตัวแบบ Kriging ตัวแบบ RBF และตัวแบบ ANN ภายใต้มิติของปัญหาทดสอบที่หลากหลายตั้งแต่ 2 ถึง 10 ตัวแปร พบว่าแผนการทดลองที่สร้างได้สามารถนำไปสร้างตัวแบบเพื่อการพยากรณ์ที่มีความแม่นยำสูง และตัวแบบ ANN ให้ความแม่นยำในการพยากรณ์สูงเมื่อจำนวนจุดทดลองมีขนาดใหญ่ ส่วนกรณีที่จำนวนจุดทดลองมีขนาดเล็ก ตัวแบบ Kriging ให้ความแม่นยำสูง ส่วนกรณีอื่น ๆ ตัวแบบ RBF และตัวแบบ ANN มีประสิทธิภาพในการพยากรณ์ใกล้เคียงกัน

Abstract

Computer simulated experiments (CSE) have been widely used to investigate complicated physical phenomena, particularly when physical experiments are not feasible due to limitations of experimental materials. The natures of CSE are time-consuming and the computer codes are expensive. Therefore, experimental designs and statistical models approaches play a major role in the context of CSE in order to overcome these problems. Many researchers have attempted to develop various surrogate models to fit the output responses from CSE. The purpose of this project is to study the optimal criteria to construct the optimal designs and to compare the prediction accuracy of three statistical models namely Kriging model, Radial basis function (RBF) model and Artificial neural network (ANN) model, respectively. The prediction accuracy of each model is validated though non-linear test problems ranging from 2 to 10 input variables and evaluated by the root mean square of error (RMSE) values. The results show that Guassian RBF model performs well when small dimension of problem with non-complex feature of output response is considered. Further, Guassian RBF model also provides high prediction accuracy for complex feature of output response with small design runs while Kriging models are the most accurate model when the design runs become larger. For medium dimensions of problem, Kriging models are suitable for small design runs while ANN model performs superior over the other models when the design runs are larger. In the case of large dimensions of problem, the results reveal that Multiquadric RBF model is the best choice to construct a surrogate model for CSE.

Executive Summary

ปัจจุบันการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ (Computer simulated experiments: CSE) ได้เข้ามามีบทบาทสำคัญในการศึกษาวิจัยด้านวิทยาศาสตร์และด้านวิศวกรรมศาสตร์ที่เกี่ยวข้องกับการหารูปแบบความสัมพันธ์ของกลุ่มตัวแปรเข้า (Input variables) และตัวแปรออก (Output response) ที่เกิดขึ้นในระบบที่มีความซับซ้อนและไม่สามารถทำการทดลองทางกายภาพ (Physical experiment) ได้ เช่น การวิเคราะห์หาปริมาณน้ำมันใต้ดินในบางพื้นที่เมื่อทราบคุณลักษณะบางประการของตัวแปรเข้าที่เกี่ยวข้องในพื้นที่นั้นๆ การศึกษาลักษณะการไหลเวียนของโลหิตเมื่อทำการทดลองฉีดยาให้กับผู้ป่วย ซึ่งจะเห็นได้ว่าการทดลองลักษณะนี้ ไม่สามารถทำการทดลองกับหน่วยทดลองจริง ๆ ได้ จึงจำเป็นต้องใช้เทคนิคการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์หรือ CSE เข้ามาช่วยในการศึกษา โดยทั่วไปแล้วการทำงานของ CSE มักจะใช้เวลานานและสิ้นเปลืองทรัพยากรมาก รวมไปถึงรหัสคอมพิวเตอร์ที่ใช้มีราคาแพง ดังนั้นนักวิจัยจึงได้ทำการคิดค้นวิธีการหากลุ่มของระดับตัวแปรเข้าที่เหมาะสมหรือแผนการทดลองที่เหมาะสม (Optimal design) เพื่อนำไปใช้ในการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ เพื่อเป็นการประหยัดทรัพยากรและสามารถนำผลลัพธ์ที่ได้หรือค่าตัวแปรออกไปใช้อย่างมีประสิทธิภาพ

ลักษณะสำคัญของ CSE คือค่าตัวแปรออกที่ได้จากการจำลอง จะมีลักษณะตรงแบบ (Deterministic) กล่าวคือทุก ๆ ครั้งที่มีการประมวลผลด้วย CSE ที่ระดับค่าคงที่ของกลุ่มตัวแปรเข้า จะส่งผลให้ได้ค่าตัวแปรออกที่คงที่เสมอ ดังนั้นแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับการทดลองประเภทนี้จึงเป็นแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิ (Space filling design) ซึ่งแผนการทดลองที่ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายมีชื่อเรียกว่า แผนการทดลองแบบลาตินไฮเปอร์คิวบ์ (Latin hypercube design: LHD) ในทางปฏิบัติการค้นหาแผนการทดลองแบบ LHD ที่เหมาะสมมักจะยุ่งยากและมีความซับซ้อน ยกตัวอย่างเช่น กรณีการสร้างแผนการทดลองที่ประกอบด้วยตัวแปรเข้าจำนวน d ตัวและจำนวนจุดทดลอง (Design run) เท่ากับ n จุด จะเห็นได้ว่ามีแผนการทดลองแบบ LHD ที่เป็นไปได้ทั้งหมดจำนวน $(n!)^d$ แผนการทดลองซึ่งจำนวนนี้จะเพิ่มขึ้นเรื่อย ๆ เป็นจำนวนมหาศาลเมื่อ n และ d มีขนาดใหญ่ขึ้น ซึ่งจะเห็นได้ว่าการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สุดจัดเป็นปัญหา NP hard ที่ไม่สามารถทำได้ด้วยมือเปล่า จึงจำเป็นต้องอาศัยการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สุดโดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้น (Search algorithm) ควบคู่กับเกณฑ์ในการเลือกค่าที่เหมาะสม (Optimality criteria) ซึ่งอัลกอริทึมการสืบค้นที่ถูกนำมาใช้ในการด้าน CSE นอกจากนี้ผลลัพธ์ที่ได้จากการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์จะถูกนำไปพัฒนาตัวแบบทางสถิติเพื่อพยากรณ์ค่าผลลัพธ์ที่ได้จากจุดทดลองใด ๆ (Untried input) ซึ่งแผนการทดลองที่จะเอื้อต่อการพัฒนาตัวแบบที่มีความแม่นยำในการพยากรณ์คือแผนการทดลองที่มีคุณลักษณะเชิงตั้งฉาก (Orthogonal property)

งานวิจัยนี้ผู้วิจัยทำการผนวกคุณสมบัติของแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับ CSE โดยพิจารณาทั้งคุณสมบัติเชิงตั้งฉากและคุณสมบัติการเติมเต็มปริภูมิ โดยทำการประยุกต์ใช้อัลกอริทึมการสืบค้น Simulated annealing algorithm ในการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมบนคลาสของแผนการทดลองแบบละตินไฮเปอร์คิวบ์ (Latin hypercube design: LHD) จากนั้นนำแผนการทดลองที่เหมาะสมไปสร้างตัวแบบในการพยากรณ์ โดยใช้ตัวแบบ 3 ชนิดที่แตกต่างกัน ประกอบด้วย ตัวแบบ Kriging ตัวแบบ RBF และตัวแบบ ANN โดยพิจารณาค่าความแม่นยำที่เกิดจากการพยากรณ์ที่มากที่สุดภายใต้สถานการณ์ต่าง ๆ เพื่อนำข้อสรุปที่ได้ไปใช้ในการเสนอแนะการเลือกใช้ตัวแบบที่เหมาะสมสำหรับพยากรณ์ค่าตัวแปรตอบสนองที่ได้จากการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์

บทที่ 1

บทนำ

รายงานนี้เป็นส่วนหนึ่งของโครงการวิจัยภายใต้การสนับสนุนโดยงบประมาณแผ่นดิน มหาวิทยาลัยนเรศวร ประจำปีงบประมาณ 2561 โดยคณะผู้วิจัยได้รับการอนุมัติให้ทำงานวิจัยนี้ โดยมีชื่อโครงการและรายละเอียดเกี่ยวกับโครงการวิจัยดังต่อไปนี้

ชื่อโครงการ (ภาษาไทย) การหาค่าเหมาะสมในการออกแบบแผนแบบทดลองสำหรับการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์

(ภาษาอังกฤษ) Optimization in Construction of Designs for Computer Simulated Experiments

คณะผู้วิจัย(ระบุสังกัดภาควิชา) และสัดส่วนที่ทำงานวิจัย (%)

หัวหน้าโครงการวิจัย

ผศ.ดร. อนามัย นาอุดม (50%)

อาจารย์ สังกัดภาควิชาคณิตศาสตร์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

ผู้วิจัยร่วม

ผศ. ดร. จรัสศรี รุ่งรัตนาอุบล (50%)

อาจารย์สังกัดภาควิชาวิทยาการคอมพิวเตอร์และเทคโนโลยีสารสนเทศ

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

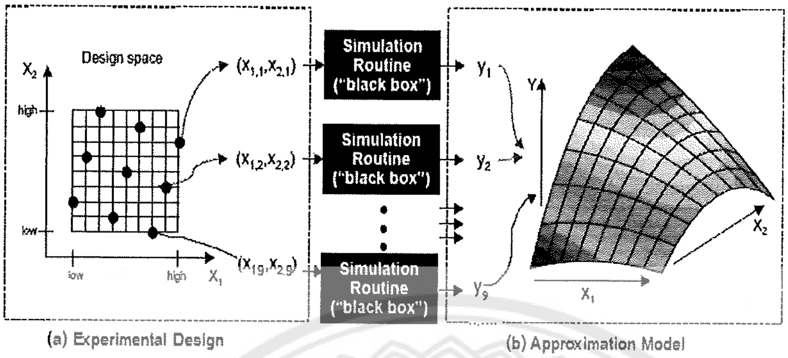
สถานที่จัดทำโครงการวิจัย

ภาควิชาคณิตศาสตร์และภาควิชาวิทยาการคอมพิวเตอร์และเทคโนโลยีสารสนเทศ
คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

ความสำคัญและที่มาของปัญหาที่ทำการวิจัย

การวางแผนการทดลอง (Design of experiments) เป็นเทคนิคทางสถิติที่ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในการออกแบบเพื่อเลือกกลุ่มค่าของตัวแปรเข้า (Input variables) ที่เหมาะสมในการทำการทดลองเพื่อศึกษารูปแบบความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรเข้าและตัวแปรออก (Output response) ที่เกิดขึ้นในระบบที่มีความซับซ้อนและไม่สามารถทำการทดลองทางกายภาพ (Physical experiments) ได้ อันเนื่องมาจากข้อจำกัดด้านวัตถุทดลอง รวมไปถึงความเสี่ยงที่จะเกิดขึ้นต่อมนุษย์และสิ่งแวดล้อม เช่นการทดลองเกี่ยวกับกัมมันตภาพรังสี หรือ การขุดเจาะน้ำมันเป็น

ต้น ดังนั้นการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ (Computer simulated experiment: CSE) ซึ่งเป็นเทคนิคที่ใช้วิธีเชิงคำนวณ (Numerical method) ผ่านตัวแบบทางคณิตศาสตร์จึงถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในการศึกษารูปแบบความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรเข้าและตัวแปรออกที่เกิดขึ้นภายในระบบเหล่านี้ กระบวนการทำงานของการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์หรือ CSE สามารถอธิบายได้ด้วยรูปที่ 1 ดังนี้



รูปที่ 1แสดงการทำงานของการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ (CSE) ดัดแปลงจาก [28]

จากรูปที่ 1 จะเห็นได้ว่ากระบวนการทำงานใน CSE สามารถแบ่งได้เป็น 3 ขั้นตอน ได้แก่

1. Experimental design คือ การวางแผนการทดลอง ซึ่งประกอบด้วยการจัดค่าระดับต่าง ๆ ของตัวแปรเข้า (Treatment combination) ที่เกี่ยวข้องทั้งหมดให้เหมาะสม

2. Simulation routine หรือ กล่องดำ (Black box) คือ กระบวนการทำงานภายในที่เราไม่สามารถมองเห็นและคาดการณ์ได้ว่าเกิดอะไรขึ้น ซึ่งกระบวนการในกล่องดำจะใช้รูปแบบสมการทางคณิตศาสตร์ที่มีความซับซ้อนประมวลผลเพื่อให้ได้ผลลัพธ์คือค่าตัวแปรออก ซึ่งผลลัพธ์ที่ได้นี้จะแปรผันตามระดับค่าต่างๆ ของตัวแปรเข้าที่ป้อนเข้าไป

3. Approximation model คือ การสร้างตัวแบบเพื่อการพยากรณ์ โดยการนำค่าของตัวแปรเข้าที่ทำการทดลองและค่าตัวแปรออกที่ได้จากกล่องดำ มาสร้างรูปแบบความสัมพันธ์ที่เหมาะสม และสามารถนำไปใช้ประโยชน์ในการพยากรณ์ค่าของตัวแปรออก หรือการหา Surrogate model นั่นเอง

จากกระบวนการทำงานของ CSE ดังกล่าวจะเห็นได้ว่าคุณภาพและความน่าเชื่อถือของผลลัพธ์ที่ได้จากการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์จะขึ้นอยู่กับการวางแผนเลือกกลุ่มของตัวแปรเข้าหรือการออกแบบการทดลอง (a) เพื่อทำการประมวลผลผ่านกระบวนการจำลอง (Simulation routine) เพื่อให้ได้ค่าของตัวแปรออก (b) ซึ่งค่าของตัวแปรออกที่ได้จากกระบวนการจำลองมักจะเป็นแบบเชิงกำหนด (Deterministic) และไม่ทราบภูมิหลัง (Prior) ดังนั้นการเลือกตัวแปรเข้าในขั้นตอน (a) จึงอาศัยหลักการกระจายจุดทดลองให้ทั่วปริภูมิมากที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้ ซึ่งแผนการทดลองดังกล่าวมีชื่อว่าแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิ (Space filling design) นั่นเอง โดยทั่วไปการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิจะใช้กระบวนการการหาค่าเหมาะสม (Optimization process) เพื่อทำการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสม (Optimal design) โดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้น (Search algorithm) ควบคู่กับเกณฑ์ในการเลือกค่าเหมาะสม (Optimality criteria) ซึ่งกระบวนการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมจัดเป็นปัญหาแบบ NP-hard และปริภูมิ (Space) ของการค้นหาจะแปรผันกับมิติปัญหาที่สนใจศึกษา นอกจากนี้กระบวนการค้นหาของอัลกอริทึมมักจะใช้เวลานานโดยเฉพาะอย่างยิ่งเมื่อมิติของปัญหาที่จะทำการทดลองมีขนาดใหญ่ และในบางสถานการณ์อัลกอริทึมการสืบค้นอาจหยุดการค้นหาเมื่อค้นพบค่าเหมาะสมเฉพาะที่ (Local optimum) เท่านั้น งานวิจัยด้านนี้จึงมุ่งเน้นค้นคว้าเพื่อนำเสนออัลกอริทึมการสืบค้นที่มีประสิทธิภาพในการค้นหาค่าเหมาะสมเชิงกลุ่ม

(Global optimum) เพื่อสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิแบบต่าง ๆ เช่น Latin hypercube design แผนการทดลองยูนิฟอร์ม (Uniform designs) เป็นต้น จากการค้นคว้างานวิจัยที่เกี่ยวข้องพบว่าการพัฒนาปรับปรุงประสิทธิภาพของอัลกอริทึมการสืบค้นนั้นจะใช้หลักการกำหนดค่าพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องสำหรับแต่ละอัลกอริทึมให้เหมาะสม การประยุกต์หลักการทางคณิตศาสตร์เข้ามาช่วยเพื่อลดปริภูมิในการค้นหาให้เล็กลงซึ่งจะส่งผลให้อัลกอริทึมสามารถทำงานได้เร็วขึ้น

เนื่องจากงานวิจัยด้าน CSE ได้ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในช่วง 2 ทศวรรษที่ผ่านมา ดังจะเห็นว่ามีผลงานวิจัยถูกรายงานไว้ค่อนข้างหลากหลายและต่อเนื่อง [2-6, 10-19, 21-33] ซึ่งงานวิจัยเหล่านี้สามารถจำแนกออกเป็น 2 กลุ่มใหญ่ ๆ ได้แก่ การออกแบบการทดลองสำหรับ CSE และการพัฒนาตัวแบบทางสถิติสำหรับ CSE สำหรับโครงการวิจัยนี้จะเน้นศึกษางานวิจัยในกลุ่มแรกคือการออกแบบการทดลองสำหรับ CSE โดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้นควบคู่กับเกณฑ์ในการเลือกค่าเหมาะสม ซึ่งโจทย์วิจัยที่สำคัญในกลุ่มนี้คือการหาวิธีในการสร้างแผนการทดลองที่ก่อให้เกิดแผนการทดลองที่มีคุณสมบัติทั้งที่เป็นแบบเติมเต็มปริภูมิและคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก (Orthogonal) อีกด้วย ทั้งนี้ เพื่อเอื้อต่อการนำแผนการทดลองที่สร้างได้ไปพัฒนาตัวแบบทางสถิติที่มีประสิทธิภาพหรือมีความแม่นยำในการพยากรณ์สูงนั่นเอง ซึ่งจากการทบทวนวรรณกรรมที่ผ่านมาพบว่า งานวิจัยส่วนใหญ่จะเน้นวิธีการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยยึดหลักการกระจายจุดทดลองให้มากที่สุด หรือเน้นหลักการออกแบบเพื่อให้ได้แผนการทดลองที่มีคุณสมบัติเชิงตั้งฉากเพียงอย่างใดอย่างหนึ่งเท่านั้น นอกจากนี้ยังพบอีกว่า ผลจากการวิจัยส่วนใหญ่มักจะนำเสนอเฉพาะแผนการทดลองและคุณสมบัติของแผนการทดลองที่สร้างได้เท่านั้น และพบว่ามีงานวิจัยเพียงส่วนน้อยที่จะนำเสนอในแง่ของการใช้แผนการทดลองที่สร้างได้ไปพัฒนาตัวแบบทางสถิติเพื่อประเมินประสิทธิภาพของตัวแบบทางสถิติ

โครงการวิจัยนี้จะเน้นศึกษาอัลกอริทึมการสืบค้น Simulated annealing algorithm (SA) และอัลกอริทึม Evolutionary search algorithm โดยพิจารณาเกณฑ์ในการเลือกค่าเหมาะสมที่นิยมใช้ในงานด้าน CSE หลายเกณฑ์ เช่น เกณฑ์แม็กซิมิน (Maximin distance criterion) เกณฑ์ที่ใช้ระยะทางแบบยูคลิด (Euclidean distance criterion) [12] เกณฑ์ ϕ_p [21] เกณฑ์ Audze-Eglais [10] เกณฑ์สหสัมพันธ์ระหว่างคอลัมน์ที่ต่ำที่สุด (Minimum pair-wise correlation) และเกณฑ์วัดความครอบคลุม (Cover measure) [26] เป็นต้น โดยจะขยายมิติของแผนการทดลองให้มีขนาดใหญ่ขึ้นจากที่เคยมีการรายงานไว้ผลงานวิจัยที่ผ่านมา ซึ่งเกณฑ์ในการเปรียบเทียบจะพิจารณาจากอัตราการลู่เข้า (Rate of convergence) และคุณสมบัติของแผนการทดลอง (Design property) ที่เหมาะสมที่ได้จากกระบวนการสืบค้นแบบต่าง ๆ นอกจากนี้ผู้วิจัยจะทำการวัดความแม่นยำในการพยากรณ์ของตัวแบบทางสถิติที่พัฒนาจากแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สร้างได้จากอัลกอริทึมการสืบค้น โดยใช้เกณฑ์ในการเปรียบเทียบคือ เกณฑ์รากที่สองของความคลาดเคลื่อนกำลังสองเฉลี่ย (Root mean square of error) ซึ่งผลที่ได้จากการวิจัยจะก่อให้เกิดวิธีการใหม่ในการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิที่เหมาะสม โดยการผสมผสานเกณฑ์หลาย ๆ ตัวเข้าด้วยกัน ซึ่งผลที่ได้จากการวิจัยจะถูกนำไปประยุกต์ใช้ในการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับวิศวกรรมเคมี และทางฟิสิกส์นิวเคลียร์เป็นต้น

บทที่ 2

กรอบแนวคิดทฤษฎี และงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้จะกล่าวถึงรายละเอียดเกี่ยวกับความสำคัญและที่มาของปัญหาวิจัย รวมไปถึงการทบทวนวรรณกรรมของการศึกษาที่เกี่ยวข้อง และรายละเอียดโดยรวมของอัลกอริทึมการสืบค้นสำหรับการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมบนคลาสของการออกแบบการทดลองแบบละตินไฮเปอร์คิวบ์ และรายละเอียดของเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมที่มีการพิจารณาคุณสมบัติของแผนแบบทดลองหลายเกณฑ์ควบคู่กัน และตัวแบบทางสถิติที่เกี่ยวข้อง เพื่อนำไปใช้ในการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ ซึ่งรายละเอียดเป็นดังนี้

กรอบแนวคิดในการทำวิจัย

การสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับงานด้าน CSE นั้นจะอาศัยวิธีฮิวริสติก (Heuristic method) ซึ่งเป็นวิธีการหาคำตอบที่เหมาะสมจากกลุ่มคำตอบที่เป็นไปได้ที่สุ่มมาทั้งหมด ซึ่งจะเกี่ยวข้องกับปัญหาการหาค่าเหมาะสม (Optimization problem) กล่าวคือ ถ้ากำหนดให้ $X \in R^d$ ซึ่ง R^d เป็นปริภูมิแบบจำกัดแต่มักมีมิติขนาดใหญ่ และกำหนดให้ $h(x)$ แทนฟังก์ชันวัตถุประสงค์ของ $X \in R^d$ ใด ๆ ดังนั้นปัญหาการหาค่าเหมาะสมในการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิ คือการหาแผนการทดลอง X^* ใดๆ ที่สอดคล้องกับเงื่อนไขต่อไปนี้

$$h(X^*) = \min_{X \in R^d} h(X) \tag{1}$$

ทั้งนี้ฟังก์ชันวัตถุประสงค์ $h(.)$ อาจหมายถึงเกณฑ์เลือกค่าเหมาะสมใด ๆ ซึ่งจะต้องมีการกำหนดไว้ล่วงหน้าก่อนจะทำการค้นหา

โดยทั่วไป อัลกอริทึมการสืบค้นที่ใช้ในการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับ CSE จะมีขั้นตอนในการทำงาน 3 ขั้นตอนหลัก ดังนี้

ขั้นตอนที่ 1: เริ่มต้นการค้นหาโดยการสุ่มเลือกแผนการทดลองตั้งต้น X^0 และกำหนดให้ $X^C = X^0$

ขั้นตอนที่ 2: สร้างโครงสร้างย่านใกล้เคียง (Neighborhood structure) หรือเพอร์เทอร์เบชัน (Perturbation) ของ X^C ตามนิยามของโครงสร้างที่ได้ระบุไว้ล่วงหน้า จากนั้นเลือกแผนการทดลอง X^{new} จากแผนการทดลองที่เป็นไปได้ทั้งหมดของโครงสร้างย่านใกล้เคียงที่สร้างขึ้นมา

ขั้นตอนที่ 3: คำนวณฟังก์ชันวัตถุประสงค์ของแผนการทดลอง X^{new} ที่เลือกมา และตัดสินใจว่าจะทำการแทนที่ X^C ด้วย X^{new} หรือไม่ จากนั้นย้อนกลับไปทำขั้นตอนที่ 2 ซ้ำไปเรื่อย ๆ เพื่อค้นหาแผนการทดลองที่มีคุณสมบัติดีขึ้นเรื่อย ๆ จนกว่าจะบรรลุเงื่อนไขของกฎการหยุดสืบค้น (Stopping rule) และทำการรายงานแผนการทดลองที่ได้ ซึ่งจะถือว่าเป็นแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สุด (Best searched design) ที่ได้จากกระบวนการสืบค้น

จากขั้นตอนการทำงานของอัลกอริทึมหาค่าเหมาะสมที่กล่าวมาข้างต้น รวมไปถึงข้อจำกัดด้านเวลา ในกรณีที่ต้องการวางแผนการทดลองที่เหมาะสม สำหรับปัญหาที่มีมิติขนาดใหญ่ขึ้น ผู้วิจัยจึงสนใจศึกษา หาวิธีการปรับปรุงประสิทธิภาพของอัลกอริทึมการสืบค้นเพื่อให้สามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพมากขึ้น ซึ่งต่อไปนี้จะได้อธิบายถึงองค์ประกอบต่าง ๆ ที่มีอิทธิพลต่อประสิทธิภาพการทำงานของอัลกอริทึมต่าง ๆ รวมไปถึงไปแนวทางในการปรับปรุงเพื่อให้อัลกอริทึมสามารถทำงานได้ดียิ่งขึ้น รายละเอียดต่าง ๆ เป็นดังต่อไปนี้

1. การกำหนดจุดตั้งต้น (Starting point) จากขั้นตอนที่ 1 ของการทำงานของอัลกอริทึมการหาค่าเหมาะสม ซึ่งเป็นการกำหนดแผนการทดลองตั้งต้น ซึ่งจะเห็นได้ว่าเป็นการกำหนดแบบสุ่มขึ้นมา (Random) ผู้วิจัยมีแนวคิดว่า แทนที่จะเริ่มต้นการค้นหาแบบสุ่ม เราสามารถประยุกต์ใช้ทฤษฎีการวางแผนทดลอง เช่น กฎของการตั้งฉากระหว่างคอลัมน์ในแผนการทดลอง (Orthogonal array) หรือ กฎการสมมาตร (Symmetry law) ของจุดทดลอง โดยมีการกำหนดจุดให้กระจายอยู่ในบริเวณของการทดลองเป็นแบบสมมาตร เมื่อมีการประยุกต์กฎเหล่านี้ เข้ามาช่วยในการกำหนดแผนการทดลองตั้งต้น ก็จะส่งผลให้ขอบเขตของการค้นหามีขนาดเล็กลง และทำให้การค้นหาสำหรับมิติขนาดใหญ่สามารถทำได้ทั่วถึงอย่างรวดเร็วยิ่งขึ้น นั่นคือใช้เวลาในการค้นหาน้อยลงนั่นเอง

2. โครงสร้างย่านใกล้เคียง (Neighborhood structure) ตามที่ได้ระบุไว้ในขั้นตอนที่ 2 เกี่ยวกับโครงสร้างย่านใกล้เคียง ซึ่งในการวางแผนการทดลองนั้นย่านใกล้เคียงหมายถึง แผนการทดลองที่มีโครงสร้างหรือคุณลักษณะใกล้เคียงกัน ในการกำหนดโครงสร้างของย่านใกล้เคียงสามารถทำได้หลายวิธี แต่วิธีที่นิยมใช้อย่างแพร่หลายในงานด้าน CSE คือการสลับสมาชิกสองแถวใด ๆ ในคอลัมน์ที่ถูกเลือกมาโดยสุ่ม เนื่องจากการสลับแบบนี้จะไม่ส่งผลกระทบใด ๆ ต่อโครงสร้างของแผนการทดลองแบบ LHD ให้เปลี่ยนแปลงไป ยกตัวอย่างเช่น โครงสร้างย่านใกล้เคียงของแผนการทดลองแบบ LHD ที่มีขนาด 5 แถว และ 4 คอลัมน์ เมื่อมีการสลับสมาชิกระหว่างแถวที่ 2 และแถวที่ 5 ภายในคอลัมน์ที่ 2 ที่ถูกสุ่มเลือกมา จะได้ผลดังรูป

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 \\ 3 & \boxed{4} & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 4 \\ 4 & \boxed{5} & 1 & 2 \\ 5 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 5 \\ 3 & \boxed{5} & 5 & 3 \\ 2 & 1 & 3 & 4 \\ 4 & \boxed{4} & 1 & 2 \\ 5 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}$$

จากรูปดังกล่าว จะเห็นได้ว่ามีจำนวนแผนการทดลองที่เป็นไปได้ทั้งหมดในโครงสร้างย่านใกล้เคียงเท่ากับ $4 \cdot \binom{5}{2} = 40$ แผนการทดลอง ซึ่งเป็นที่ชัดเจนว่าถ้ามิติของแผนการทดลองมีขนาดใหญ่ขึ้น ย่อมส่งผลให้จำนวนแผนการทดลองที่เป็นไปได้ทั้งหมดในโครงสร้างย่านใกล้เคียงเพิ่มขึ้นตามไปด้วย จะเห็นได้ว่าการเลือกใช้โครงสร้างย่านใกล้เคียงที่เหมาะสมจึงเป็นสิ่งสำคัญอย่างยิ่ง จากแนวคิดเกี่ยวกับโครงสร้างย่านใกล้เคียงนี้ ผู้วิจัยมีจุดมุ่งหมายที่จะปรับปรุงโครงสร้างในการทำงานของอัลกอริทึมการสืบค้นให้มีประสิทธิภาพมากขึ้นโดยเน้นการกำหนดจุดตั้งต้นที่ดีโดยใช้หลักการคณิตศาสตร์เข้ามาช่วย นอกจากนี้ยังมีการตรวจสอบโครงสร้างย่านใกล้เคียงโดยการแลกเปลี่ยนสมาชิกจะเกิดเฉพาะบริเวณที่จะก่อให้เกิดแผนการทดลองที่มีคุณสมบัติดีขึ้นเท่านั้นภายใต้เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมที่พิจารณา

เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสม (Optimality criteria) เป็นเกณฑ์ที่จำเป็นต้องใช้ควบคู่สำหรับอัลกอริทึมการสืบค้นเพื่อใช้ในการพิจารณาคุณสมบัติของแผนการทดลองที่ได้จากการค้นหา ซึ่งเกณฑ์ที่บ่งบอกคุณสมบัติการเติมเต็มปริภูมิได้แก่ เกณฑ์แม็กซิมิน เกณฑ์ ϕ_p เป็นต้น ส่วนเกณฑ์ที่บ่งบอกความเป็นเชิงตั้งฉากได้แก่ เกณฑ์เฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลอง เนื่องจากเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมของการวิจัยในครั้งนี้ ได้แก่ เกณฑ์ ϕ_p และค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองนั้นก่อนที่จะคำนวณได้จะต้องหาค่าระยะแบบยุคลิด [21] ก่อน ระยะทางแบบยุคลิด ใช้สำหรับการหาระยะห่างระหว่างจุดทดลอง ซึ่งเป็นเมทริกซ์ที่มีมิติ $n \times n$

สมาชิกในแนวทแยงมุมมีค่าเท่ากับ 0 สมาชิกที่อยู่ด้านบนและด้านล่างของสมาชิกในแนวทแยงมุมจะสมมาตรกันและสูตรที่ใช้ในการหาระยะทางแบบยุคลิดคือ

$$d\left(x_i, x_j\right) = d_{ij} = \left[\sum_{l=1}^{d}\left(x_i^{(l)} - x_j^{(l)}\right)^2\right]^{1/2} \tag{2}$$

โดยที่ $d\left(x_i, x_j\right)$ หรือ d_{ij} คือ ระยะทางแบบยุคลิดของสมาชิกในจุดทดลองที่ i และจุดทดลองที่ j และ l แทนจำนวนตัวแปรอิสระ เมื่อ $l = 1, 2, \ldots, d$

และเมื่อนำจุดทดลอง i และ j ไปแทนค่าในสมการ (5) จะได้เมทริกซ์ระยะทาง แบบยุคลิด $(\boldsymbol{D})$ คือ

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n1} & d_{n2} & \cdots & d_{nn} \end{bmatrix}_{n\times n}$$

จากเมทริกซ์ระยะทางข้างต้นสามารถหาเกณฑ์แม็กซิมิน (Maximin distance criterion) [12] ได้จากสมการต่อไปนี้

$$\text{maximin} = \max \min_{i,j} d\left(X_{i.}, X_{j.}\right); i \neq j; 1 \leq i, j \leq n \tag{3}$$

โดยที่ $d\left(X_{i.}, X_{j.}\right)$ แทนระยะทางแบบยุคลิดของสมาชิกในจุดทดลองที่ i และจุดทดลองที่ j เนื่องจากเกณฑ์แม็กซิมินเป็นเกณฑ์ที่ไม่ค่อยละเอียดนัก ต่อมา Morris and Mitchell (1995) ได้นำเสนอเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมที่พัฒนามาจากเกณฑ์แม็กซิมิน คำนวณได้จากสูตรต่อไปนี้

$$\phi_p = \left[\sum_{j=1}^{m} J_j d_j^{-p}\right]^{1/p} \tag{4}$$

โดยที่ d_j คือระยะทาง (Distance list) $\left(d_1, d_2, \ldots, d_m\right)$ ซึ่ง $d_1 < d_2 < \ldots < d_m$

J_j คือดัชนี (Index list) $\left(J_1, J_2, \ldots, J_m\right)$ ซึ่งเป็นจำนวนคู่ของจุดทดลองในแผนการทดลองที่ถูกแยกออกโดยระยะทาง d_j

p แทนจำนวนเต็มบวก และ m มีค่าอยู่ระหว่าง 1 ถึง $\binom{n}{2}$ เนื่องจากเราพิจารณาเมทริกซ์เฉพาะสมาชิกด้านบนของสมาชิกในแนวทแยงมุมของเมทริกซ์ระยะทาง ต่อมา Jin, Chen and Sudjianto [11] ได้นำเสนอสมการในการหาค่า ϕ_p ที่ง่ายกว่าสมการ (7) ดังต่อไปนี้

$$\phi_p = \left[\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\frac{1}{d_{ij}^{\ p}}\right]^{1/p} \tag{5}$$

เมื่อ d_{ij} คือ ระยะทางแบบยุคลิดของสมาชิกในจุดทดลองจุดที่ i และจุดทดลองจุดที่ j เมื่อพิจารณาคุณลักษณะของแผนการทดลองจากเกณฑ์ ϕ_p แผนการทดลองใดที่ค่า ϕ_p น้อยที่สุดในมิติปัญหานั้นๆ แสดงว่าแผนการทดลองดังกล่าวเป็นแผนการทดลองที่ดีที่สุด

สำหรับเกณฑ์ที่ใช้ในการวัดคุณสมบัติเชิงตั้งฉากได้แก่ ค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลอง (Mean of correlation between design columns) การหาค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองคือ การหาค่าเฉลี่ยของสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเพียร์สัน (Pearson correlation coefficient) นั่นเอง ซึ่งเป็นเกณฑ์ที่ใช้วัดความสัมพันธ์ของตัวแปรอิสระทีละคู่ในแต่ละสดมภ์ของแผนการทดลอง สัมประสิทธิ์

สหสัมพันธ์ของเพียร์สันจะมีค่าอยู่ระหว่าง -1 ถึง 1 สมาชิกในแนวทแยงมุมมีค่าเท่ากับ 1 สัญลักษณ์ที่ใช้คือ r และสูตรที่ใช้ในการคำนวณคือ

$$r_{ij}=\frac{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{ui}-\bar{x}_{i}\right)\left(x_{uj}-\bar{x}_{j}\right)}{\sqrt{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{ui}-\bar{x}\right)^{2}}\sqrt{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{uj}-\bar{x}_{j}\right)^{2}}} \qquad (6)$$

เมื่อ r_{ij} คือ สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเพียร์สันระหว่างสดมภ์ที่ i กับสดมภ์ที่ j

สำหรับแผนการทดลองที่ประกอบด้วยตัวแปรอิสระ d ตัว สหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองจะมีจำนวนทั้งหมด $\binom{d}{2}$ ค่า เมื่อได้ค่าของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองจำนวน $\binom{d}{2}$ ค่าแล้วจึงนำค่าที่ได้จากแต่ละครั้งมาเฉลี่ยกันและเมื่อพิจารณาคุณลักษณะของแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิจากค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลอง แผนการทดลองใดที่มีค่าดังกล่าวเข้าใกล้ศูนย์มากที่สุดในมิติปัญหานั้น ๆ แสดงว่าแผนการทดลองดังกล่าวเป็นแผนการทดลองที่ดีที่สุด

กล่าวโดยสรุปคือ งานวิจัยนี้จะมุ่งเน้นพัฒนาวิธีการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิโดยพิจารณาเกณฑ์การหาค่าเหมาะสมที่หลากหลาย เพื่อให้ได้แผนการทดลองที่คุณสมบัติทั้งการเติมเต็มปริภูมิและคุณสมบัติเชิงตั้งฉากไปพร้อม ๆ กัน นอกจากนี้ยังมุ่งหมายที่จะปรับปรุงประสิทธิภาพของอัลกอริทึมการสืบค้นที่ได้รับความนิยมและมีประสิทธิภาพดีกว่าอัลกอริทึมอื่น ๆ ได้ อัลกอริทึมการสืบค้นแบบ SA และ ESE เช่น การกำหนดแผนการทดลองตั้งต้นโดยใช้หลักการก่อกำเนิดทางคณิตศาสตร์แบบต่าง ๆ เข้ามาช่วย เช่น จุดแลซทิซ จุด periodic เป็นต้น และจะมีการปรับกฎการแทนที่เพื่อให้อัลกอริทึมสามารถทำงานได้ดียิ่งขึ้น หลังจากทำการปรับปรุงโครงสร้างการทำงานของอัลกอริทึมการสืบค้นทั้งสองแบบแล้วก็จะทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของอัลกอริทึมดังกล่าวกับประเภทอื่น ๆ เมื่อกำหนดมิติแผนการทดลองที่แตกต่างกัน รวมไปถึงการนำแผนการทดลองไปพัฒนาตัวแบบทางสถิติ เพื่อวัดค่าความแม่นยำในการพยากรณ์อีกด้วย ทั้งนี้เพื่อเป็นแนวทางในการเลือกใช้แผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิและอัลกอริทึมสำหรับแต่ละขนาดของปัญหาที่สนใจศึกษา และขยายขอบเขตของการศึกษาการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับมิติใหญ่ขึ้นอีกด้วย

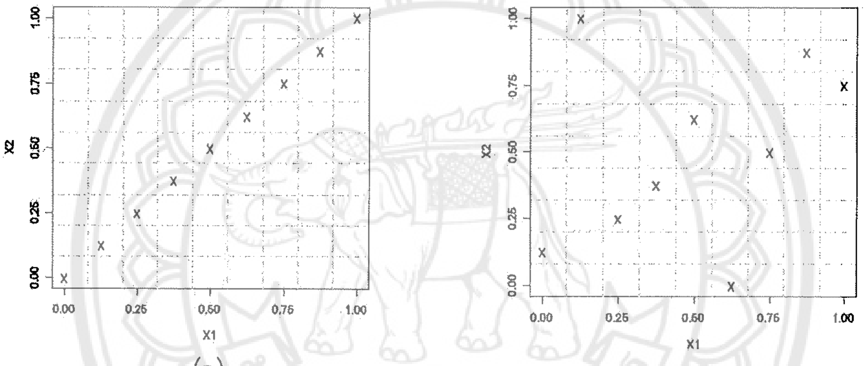
การทบทวนวรรณกรรม/สารสนเทศ (Information) ที่เกี่ยวข้อง

การจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ (Computer simulated experiments: CSE) ได้ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายเพื่อศึกษารูปแบบของระบบที่มีความซับซ้อนและไม่สามารถทำการทดลองทางกายภาพ (Physical experiment) ทั่วไปได้ Sacks et al. [25] รายงานว่าเวลาที่ใช้ในกระบวนการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์มักจะใช้เวลานานมาก เช่น การจำลองคอมพิวเตอร์ในงานด้านวงจรอิเลคทรอนิคส์อาจใช้เวลาเป็นวันในการหาค่าตัวแปรออกเพียง 1 ค่า ดังนั้นเพื่อเป็นการลดปัญหาที่เกิดขึ้น จึงได้มีการใช้ทฤษฎีทางสถิติเข้ามาใช้ในงานด้าน CSE ซึ่งประกอบด้วยการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมบนคลาสของละตินไฮเปอร์คิวบ์ (Optimal Latin hypercube design: OLHD) และการพัฒนาตัวแบบทางสถิติเพื่อใช้ในการพยากรณ์ โครงการวิจัยนี้ผู้วิจัยจะเน้นศึกษาวิธีการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมหรือ OLHD เพื่อใช้ใน CSE ซึ่ง Simpson et al. [28] ระบุไว้ว่าผลลัพธ์ที่ได้จาก CSE จะมีลักษณะเป็นแบบ Deterministic นั่นคือ การทำการทดลองที่ค่าตัวแปรเข้าที่คงที่จะก่อให้เกิดค่าตัวแปรออกที่คงที่เสมอ ซึ่งจะเห็นได้ว่า การทำซ้ำ (Replicate) จะไม่มีความเกี่ยวข้องกับ CSE ดังนั้นการวางแผนการทดลองจึงมุ่งเน้นเพื่อกระจายจุดทดลองให้ทั่วถึงปริภูมิของการทดลอง (Space filling design) ให้มากที่สุด ซึ่งแผนการทดลองที่ใช้อย่างแพร่หลายใน CSE คือ แผนการทดลองแบบละตินไฮเปอร์คิวบ์ (Latin hypercube design: LHD) ซึ่งแผนการ

ทดลองนี้ถูกนำเสนอโดย Mckay et al. [19] ในปี ค.ศ.1979 คุณลักษณะพิเศษของแผนการทดลองแบบ LHD คือจุดทดลองทุกจุดจะไม่มีการทับซ้อนกันเมื่อฉายภาพ (Projection) จากแต่ละมิติของตัวแปรเข้าใด ๆ แผนการทดลองแบบ LHD คือเมทริกซ์ X ซึ่งประกอบไปด้วย n แถว และ d คอลัมน์ เมื่อ n คือจำนวนรัน (จุดทดลอง) ในแผนการทดลองและ d คือจำนวนตัวแปรเข้าในแผนการทดลอง การสร้างแผนการทดลองแบบ LHD สามารถทำได้ดังสมการที่ (7)

$$X_{ij} = \frac{\pi_{ij} - U_{ij}}{n} \tag{7}$$

เมื่อ π_{ij} เป็นตัวเลขที่เกิดจากการสลับตัวเลขแบบสุ่มที่ได้จากการแจกแจงแบบเอกรูป (Uniform distribution) จาก 1 ถึง n และ U_{ij} มีการแจกแจงแบบ $U[0,1]$ ซึ่งในทางปฏิบัติ การสร้าง LHD สามารถทำได้โดยการสับเปลี่ยนแบบสุ่ม (Random permutation) ตัวเลข 1 ถึง n ในแต่ละคอลัมน์ จากนั้นนำตัวเลขที่ได้จากทั้งหมด d คอลัมน์มาผนวกเข้าด้วยกันเป็นเมทริกซ์ของแผนการทดลอง X ซึ่งวิธีการนี้จะทำให้การกระจายของแต่ละจุดทดลองจะเป็นไปโดยสุ่มและไม่สามารถรับรองได้ว่าการกระจายของจุดจะทั่วถึงปริภูมิของการทดลองหรือไม่ ซึ่งสามารถพิจารณาจากรูปที่ 1



(a) (b)

รูปที่ 2: แสดงแผนการทดลอง 9×2 LHD แบบสุ่ม

จากรูปที่ 2(a) จะเห็นได้ว่าแผนการทดลองแบบ LHD ที่ได้จากการสุ่มตามวิธีการข้างต้นไม่มีคุณสมบัติที่ดีคือขาดคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก ส่วนรูปที่ 2(b) แม้ว่าจะมีคุณสมบัติที่ดีขึ้นแต่จะเห็นได้ว่ามีบางพื้นที่ของปริภูมิของการทดลอง (Design space) อาจจะไม่ถูกสำรวจก็ได้ เพื่อทำการกระจายจุดทดลองให้ทั่วปริภูมิของแผนทดลอง นักวิจัยได้ประยุกต์ใช้อัลกอริทึมการสืบค้น (Search algorithm) ควบคู่กับเกณฑ์ในการเลือกค่าเหมาะสม (Optimality criteria) เพื่อสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมและมีคุณสมบัติความเติมเต็มปริภูมิและเชิงตั้งฉาก ดังที่ได้รายงานไว้ในงานวิจัยหลายชิ้น [2, 3, 8, 10, 11, 12, 14, 26, 29] ซึ่งรายงานไว้ว่า OLHD เป็นแผนการทดลองที่มีประสิทธิภาพดีกว่าแผนการทดลองแบบ Simple random sequence ทั่ว ๆ ไป แต่ทั้งนี้การค้นหาแผนการทดลอง LHD ที่เหมาะสม หรือ OLHD นั้นไม่ใช่เรื่องง่าย โดยเฉพาะอย่างยิ่งในกรณีที่มิติของแผนการทดลองมีขนาดใหญ่ขึ้น [5, 15, 25, 20, 38] ตัวอย่างบางส่วนของงานวิจัยที่ได้เสนอการสร้างแผนการทดลองแบบ OLHD โดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้นควบคู่กับเกณฑ์เลือกค่าเหมาะสม เช่น การค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้นควบคู่กับเกณฑ์ในการเลือกค่าที่เหมาะสมนั้นได้ถูกนำเสนอไว้หลายวิธี เช่น Morris and Mitchell [21] ได้พัฒนาอัลกอริทึม Simulated annealing (SA) ภายใต้เกณฑ์ ϕ_p จากนั้น Li and Wu [17] ได้เสนอการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สุดโดยใช้อัลกอริทึม CP ภายใต้เกณฑ์ Integrated mean square error (IMSE) และ เกณฑ์เอ็นโทรพี (Entropy criteria) ต่อมา Jin et al. [11] ได้ดัดแปลงอัลกอริทึมวิวัฒนาการแบบสุ่ม (Enhanced stochastic evolutionary algorithm) เพื่อทำการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยพิจารณาเกณฑ์ที่หลากหลายเช่น เกณฑ์

Maximin distance เกณฑ์ ϕ_p และเกณฑ์ Entropy ในปีถัดมา Liefvendahl and Stocki [18] ประยุกต์อัลกอริทึมแบบเจเนติก (Genetic algorithm: GA) เพื่อทำการค้นหาแผนการทดลองที่ดีที่สุด ภายใต้เกณฑ์ ϕ_p และ เกณฑ์ Maximin จากงานวิจัยของ Rungrattanaubol and Na-udom [30] ได้ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของ SA และ GA ในแง่ของความเร็วในการลู่เข้าสู่ค่าที่เหมาะสม (Rate of convergence) และพบว่า SA สามารถทำงานได้ดีกว่า GA เกือบทุกกรณีของการศึกษา นอกจากนี้ Joseph and Hung [13] เสนอการสร้างแผนการทดลองแบบ LHD โดยพิจารณาเกณฑ์ Maximin distance และเกณฑ์ Minimum pair-wise correlation ควบคู่กันโดยใช้อัลกอริทึมที่พัฒนาขึ้นมาใหม่และเปรียบเทียบผลที่ได้กับงานวิจัยที่ได้รายงานไว้ใน Morris and Mitchell [21] พบว่าประสิทธิภาพของแผนการทดลองมีคุณสมบัติที่ดีพอ ๆ กัน งานของ Cioppa and Lucas [5] ได้เสนออัลกอริทึมสำหรับสร้างแผนการทดลอง OLHD ที่มีมิติใหญ่ขึ้นเมื่อเทียบกับงานวิจัยก่อนหน้า นอกจากนี้ยังพบว่าวิธีที่นำเสนอขึ้นมาก่อให้เกิดแผนการทดลองที่มีคุณสมบัติที่ดีมากในแง่ของความเติมเต็มปริภูมิและคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก จากนั้น Steinberg [29] เสนอการวางแผนการทดลองแบบ Orthogonal LHD โดยพยายามทำให้ค่าสหสัมพันธ์ระหว่างคอลัมน์ของแผนการทดลองมีค่าน้อยที่สุด ซึ่งเป็นการขยายงานที่นำเสนอไว้ใน Ye [31] เพื่อทำให้สามารถสร้างแผนการทดลองที่มีมิติใหญ่ขึ้นได้ ส่วน Prescott [23] เสนอการสร้างแผนการทดลองแบบ LHD ที่มีค่า pair-wise correlation เท่ากับ 0 และพิจารณาว่าคุณสมบัติดังกล่าวมีความสัมพันธ์กับคุณสมบัติความเติมเต็มปริภูมิหรือไม่ อย่างไรก็ตามข้อจำกัดของงานวิจัยชิ้นนี้คือวิธีการที่นำเสนอสามารถทำได้เฉพาะกรณีมิติของปัญหาขนาดเล็กเท่านั้น เช่นในงานวิจัยของ Viana et al. [33] ได้นำเสนออัลกอริทึมในการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยพิจารณาเกณฑ์ ϕ_p ในส่วนของการเสนออัลกอริทึมเพื่อสร้างแผนการทดลอง OLHD สามารถดูได้จาก Grosso et al. [8] ซึ่งเสนอวิธีสร้างแผนการทดลองแบบ LHD ที่เหมาะสมโดยใช้ Iterated Local Search (ILS) ซึ่งผลที่ได้พบว่าวิธีการดังกล่าวสามารถทำได้ดีเมื่อเปรียบเทียบกับงานที่เสนอไว้ใน Morris and Mitchell [21] และงานของ Jin et al. [11] แต่อย่างไรก็ตามวิธี ILS ในงานวิจัยดังกล่าวยังมีข้อจำกัดด้านมิติของปัญหาที่มีขนาดเล็กเท่านั้น งานวิจัยของ Husslage and Rennen [10] ได้เสนอวิธีการสร้างแผนทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิโดยใช้จุดเริ่มต้นแบบต่าง ๆ และวัดคุณสมบัติของแผนการทดลองโดยใช้เกณฑ์ Audze-Eglais และสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิโดยใช้ SA และ ESE และเปรียบเทียบประสิทธิภาพของอัลกอริทึมกับกับ Permutation genetic algorithm (PGA)

จากที่กล่าวมาข้างต้น จะเห็นได้ว่าการพัฒนาวิธีการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิที่เหมาะสมมีความจำเป็นอย่างยิ่ง ซึ่งโครงการวิจัยนี้จะเน้นการผสมผสานเกณฑ์การหาค่าเหมาะสมเข้าด้วยกัน และปรับปรุงการทำงานของอัลกอริทึมการสืบค้น SA และ ESE เพื่อให้ได้อัลกอริทึมที่สามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพมากขึ้น ซึ่งผลที่ได้จากโครงการวิจัยนี้บางส่วนจะถูกนำไปประยุกต์ใช้จริงกับการวางแผนการทดลองด้านการแยกน้ำมันออกจากน้ำเสีย เป็นต้น

วัตถุประสงค์ของการวิจัย

1. เพื่อนำเสนอวิธีการสร้างแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิที่เหมาะสมสำหรับ CSE โดยใช้กระบวนการหาค่าเหมาะสม
2. เพื่อปรับปรุงกระบวนการค้นหาของอัลกอริทึมการสืบค้นให้มีประสิทธิภาพมากขึ้นโดยใช้การลดปริภูมิของการค้นหา
3. เพื่อนำแผนการทดลองเหมาะสมที่ได้จากอัลกอริทึมการสืบค้นไปพัฒนาตัวแบบทางสถิติโดยทดลองใช้กับการจำลองทางด้านวิศวกรรมเคมี

ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. งานวิจัยนี้จะก่อให้เกิดวิธีการเลือกเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมในการสร้างแผนการทดลองโดยใช้อัลกอริทึมการสืบค้นที่มีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้นและสามารถใช้งานได้ง่ายขึ้น และจะได้ข้อสรุปใหม่ ๆ เกี่ยวกับการสร้างแผนการทดลองที่มีมิติของปัญหาใหญ่ขึ้น
2. ทำให้ทราบถึงแนวทางการปรับกระบวนการค้นหาที่เกี่ยวข้องกับอัลกอริทึมการสืบค้นเพื่อให้สามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพมากขึ้น
3. พัฒนาศักยภาพนักวิจัยในโครงการและผลิตผลงานเพื่อตีพิมพ์ในวารสารระดับนานาชาติ เช่น International Journal of Applied Mathematics and Computer Science ได้
4. จัดทำฐานข้อมูลของแผนการทดลองที่สร้างได้เพื่อง่ายต่อการเข้าถึงของนักวิจัยที่สนใจนำการทดลองไปใช้

ขอบเขตการวิจัย

การวิจัยนี้เป็นการวิจัยโดยใช้ข้อมูลจากการจำลอง (Simulation) ข้อมูลภายใต้สถานการณ์ต่าง ๆ เนื่องจากข้อจำกัดด้านวัตถุทดลองที่ไม่เอื้อต่อการทดลองจริงได้ และจะต้องมีการทำซ้ำเพื่อประเมินค่าความแม่นยำของการพยากรณ์ ผลสรุปที่ได้จากการวิจัยจะถูกนำไปตีพิมพ์เผยแพร่ในวารสารระดับนานาชาติ เช่น Journal of Applied Statistics นอกจากนี้จะนำผลสรุปที่ได้ไปใช้เพื่อการออกแบบการทดลองและการสร้างตัวแบบเพื่อการพยากรณ์ในงานทางด้านวิศวกรรมเคมีต่อไป โดยขอบเขตของโครงการวิจัยสามารถสรุปได้ดังนี้

7.1 ศึกษาเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสม 3 วิธี ดังนี้

1) L_2 Centered-discrepancy criterion
2) ϕ_p criterion
3) Audze-Eglais
4) Kullback-Leiber criterion

7.2 กำหนดแผนการทดลองที่ใช้กับตัวแบบทางสถิติ คือ แผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิหรือ OLHD จำนวน 10 แผนการทดลอง

7.3 ตัวแบบทางสถิติ ประกอบด้วยตัวแบบที่ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในงานวิจัยด้าน CSE

1) Kriging mdel
2) Radial basis function
3) Neural network

7.4 กำหนดมิติของปัญหา (n,d) โดยกำหนดให้ d คือจำนวนตัวแปรเข้า และ n คือจำนวนจุดทดลอง ซึ่งจำนวนจุดทดลองที่น้อยที่สุดสำหรับแผนการทดลองแบบ OLHD กำหนดให้มีจำนวนเท่ากับจำนวนพารามิเตอร์ของตัวแบบพหุนามกำลังสอง และจำนวนจุดทดลองที่มากที่สุดสำหรับแผนการทดลองแบบ OLHD [18] คำนวณจาก

$$n = 2d + 4\binom{d}{2} + 1 \quad (7.1)$$

7.5 กำหนดปัญหาการทดสอบในการศึกษาเปรียบเทียบความแม่นยำในการพยากรณ์ของตัวแบบทางสถิติ 3 ตัวแบบ ผู้วิจัยได้เลือกปัญหาทดสอบที่มีลักษณะแบบไม่เชิงเส้น ซึ่งบางปัญหาทดสอบจะมีความซับซ้อนมาก และบางปัญหาทดสอบจะมีความซับซ้อนน้อย ซึ่งในงานวิจัยนี้จะนิยามความซับซ้อนของปัญหาทดสอบตามอัตราการเปลี่ยนแปลงของพื้นผิวบนระนาบของกราฟ 3 มิติ เมื่อค่าของตัวแปรเข้า x แต่ละตัวเปลี่ยนแปลงไป โดยเลือกปัญหา

ทดสอบจากงานวิจัยของ Hock and Schittkowski [12]; Simpson [34]; Muller and Messac [25]; Welch, et al., [38]; Na-udom and Rungrattanaubol [29]

7.6 เกณฑ์ที่ใช้ในการวัดความแม่นยำของตัวแบบทางสถิติ คือ

1) เกณฑ์ RMSE ซึ่งสามารถคำนวณได้ดังนี้

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{k}\left(y_i - \hat{y}_i\right)^2}{k}} \qquad (7.2)$$

เมื่อ k คือ จำนวนจุดทดสอบ

y_i คือ ตัวแปรตามที่เป็นจริงสำหรับจุดทดสอบที่ i , $i = 1, 2, \ldots k$

$\hat{y}_i$ คือ ผลลัพธ์จากการพยากรณ์สำหรับจุดทดสอบที่ i , $i = 1, 2, \ldots k$

2) เกณฑ์ PI ซึ่งสามารถคำนวณได้ดังนี้

$$PI = \frac{RMSE(RSM) - RMSE(KRG, RBFG, RBFM, RBFT)}{RMSE(RSM)} \times 100\% \qquad (7.3)$$

7.7 ข้อมูลที่ใช้ในการศึกษาได้จากการจำลองโดยใช้โปรแกรม R เวอร์ชัน 3.3.4

7.8 ทดลองใช้วิธีการวางแผนการทดลองและตัวแบบทางสถิติที่พัฒนาขึ้นมากับปัญหาการสกัดปริมาณน้ำมันปาล์มซึ่งเป็นปัญหาทางวิศวกรรมเคมี

วิธีดำเนินการวิจัย

1. ศึกษาและค้นคว้าทฤษฎีและผลงานตีพิมพ์ที่เกี่ยวข้อง
2. ศึกษาแนวคิดและวิธีการสร้างแผนการทดลอง และหลักการทำงานของตัวแบบทางสถิติแบบต่าง ๆ
3. ศึกษาวิธีการการหาเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสม และวิธีการประมาณค่าพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับตัวแบบทางสถิติต่าง ๆ
4. วัดคุณสมบัติของเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมแบบต่าง ๆ และค่าความแม่นยำในการพยากรณ์ของตัวแบบทางสถิติที่เกี่ยวข้องทุกแบบ และพิจารณาข้อเด่น/ข้อด้อย ของแผนการทดลองและตัวแบบเหล่านี้ภายใต้มิติปัญหาที่มีลักษณะแตกต่างกัน
5. ทำการวิเคราะห์และสรุปผลเพื่อเสนอแนะวิธีการเลือกใช้ตัวแบบทางสถิติที่เหมาะสมสำหรับแต่ละมิติปัญหา
6. สรุปผลที่ได้และจัดทำบทความวิจัยเพื่อตีพิมพ์ผลงานลงในวารสารวิชาการระดับนานาชาติ และเผยแพร่แผนการทดลองที่สร้างได้รวมไปถึงวิธีการเลือกใช้ผ่านเว็บไซต์ของกลุ่มวิจัย

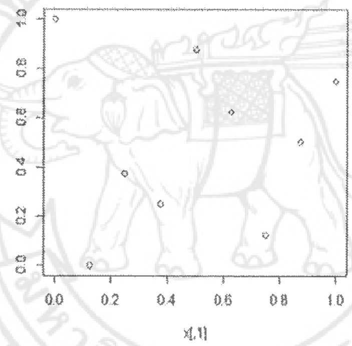
บทที่ 3

วิธีดำเนินการวิจัย

ในบทนี้ผู้วิจัยจะกล่าวถึงรายละเอียดของการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับ CSE โดยใช้แผนแบบ LHD ที่มีการพิจารณาคุณสมบัติของแผนการทดลองที่เหมาะสม และนำไปพยากรณ์ค่าตัวแปรตอบสนองโดยใช้ตัวแบบทางสถิติที่แตกต่างกัน 3 ตัวแบบ โดยมีรายละเอียดดังต่อไปนี้

3.1 คลาสการออกแบบละตินไฮเปอร์คิวบ์ (Latin Hypercube Design: LHD)

แผนการทดลองแบบละตินไฮเปอร์คิวบ์ คือการออกแบบการทดลองที่เน้นการกระจายจุดทดลองให้ครอบคลุมปริภูมิของการทดลองให้มากที่สุด โดยใน แผนการทดลองหนึ่ง ๆ จะประกอบด้วย n จุดทดลองหรือรัน และแต่ละจุดทดลองจะประกอบด้วยตัวแปรเข้า d ตัว ซึ่งสามารถมองเป็น
เมทริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ n x d ได้ แผนการทดลองแบบ LHD จะมีลักษณะสำคัญคือ ค่าที่กำหนดให้ตัวแปรแต่ละคอลัมน์จะต้องมีค่าไม่ซ้ำกัน ดังแสดงในรูปที่ 3.1



$$\begin{bmatrix} 0.500 & 0.875 \\ 0.750 & 0.125 \\ 0.875 & 0.500 \\ 1.000 & 0.750 \\ 0.125 & 0.000 \\ 0.000 & 1.000 \\ 0.375 & 0.250 \\ 0.625 & 0.625 \\ 0.250 & 0.375 \end{bmatrix}$$

รูปที่ 3.1 แผนการทดลอง LHD ขนาด 9 x 2

รูปที่ 3.1 แสดงตัวอย่างการกระจายจุดทดลองกรณีจำนวนตัวแปรเข้าที่สนใจศึกษาเท่ากับ 2 ตัวแปร และต้องการทำการทดลองทั้งหมด 9 รัน โดยรูปทางด้านขวามือแสดงเมทริกซ์ของการทดลอง 9 x 2 ที่สอดคล้องกับแผนการทดลองทางด้านซ้าย จะเห็นได้ว่าค่าของสมาชิกในแต่ละคอลัมน์ในเมทริกซ์จะไม่ซ้ำกัน

ในงานวิจัยนี้ได้ใช้รูปแบบการจัดค่าให้อยู่ในช่วง [0,1] ที่มีระยะห่างเท่าๆ กันซึ่งเมื่อพิจารณาแล้วการสร้างแผนการทดลอง LHD ใหม่เกิดจากการสลับสมาชิกในแต่ละคอลัมน์ ดังนั้นจำนวนแผนการทดลองที่เป็นไปได้ทั้งหมดคือ $(n!)^d$ ซึ่งในตัวอย่างนี้เท่ากับ $(9!)^2$ หรือประมาณ 131,681 ล้านแผนการทดลอง ซึ่งการหาแผนการทดลองที่ดีที่สุดในที่นี้ทำได้ยาก และยิ่งเมื่อมิติมีขนาดใหญ่ขึ้นยิ่งทำให้การค้นหาแผนการทดลองที่ดีที่สุดในเวลาจำกัดแทบเป็นไปไม่ได้ ดังนั้นนักวิจัยส่วนใหญ่จึงใช้วิธีค้นหาแบบฮิวริสติก (Heuristic search algorithm) โดยจะเป็นการค้นหาแผนการทดลองที่เหมาะสมควบคู่กับเกณฑ์การหาค่าความเหมาะสม (Optimality criteria) ที่กำหนดไว้

3.2 อัลกอริทึมการสืบค้น Simulated annealing algorithm (SA)

ในการทดลองที่มิติปัญหามีขนาดใหญ่นั้น จำนวนแผนการทดลองทั้งหมดที่เป็นไปได้ของแผนการทดลองแบบ LHD จะมีจำนวนมากและเป็นไปได้ยากที่จะหาแผนการทดลองที่เหมาะสมจากแผนการทดลองทั้งหมดได้ ดังนั้นการใช้ขั้นตอนวิธีการสืบค้นควบคู่กับเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมจึงเป็นทางเลือกหนึ่งที่ช่วยแก้ไขปัญหาดังกล่าว ขั้นตอนวิธีการสืบค้นที่ถูกใช้อย่างกว้างขวาง ได้แก่ SA, GA และ CP เป็นต้น แต่เนื่องจาก SA เป็นขั้นตอนวิธีการสืบค้นที่ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายและมีงานวิจัยได้ทำการเปรียบเทียบประสิทธิภาพของ SA, GA และ CP ซึ่งผลการศึกษาปรากฏว่า SA เป็น ขั้นตอนวิธีการสืบค้นที่มีประสิทธิภาพเหนือกว่าทั้ง CP และ GA (Leary, et al., 2003; Rungrattanaubol and Na-udom, 2007) ดังนั้นในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยเลือกใช้ SA เป็นขั้นตอนวิธีการสืบค้นควบคู่กับเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมคือ เกณฑ์ ϕ_p เข้ามาช่วยในการตัดสินใจว่าจะหยุดการสืบค้นและรายงานแผนการทดลองที่เหมาะสมเมื่อใด Morris and Mitchell (1995) ได้ดัดแปลงขั้นตอนวิธีการสืบค้นคือ SA เพื่อหาแผนการทดลองที่เหมาะสมโดยใช้เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมคือ เกณฑ์ ϕ_p หลักการทำงานของ SA จะใช้หลักการสลับสมาชิกของ 2 จุดทดลองอย่างสุ่มในแผนการทดลอง ซึ่งการสลับสมาชิกของขั้นตอนวิธีการสืบค้นใน SA จะพิจารณาคุณสมบัติของแผนการทดลองว่าดีขึ้นหรือไม่โดยใช้เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสม ϕ_p

ขั้นตอนการทำงานของ SA มีดังต่อไปนี้

ขั้นตอนที่ 1 กำหนดค่า t_0, I_{MAX}, FAC_t และ p

ขั้นตอนที่ 2 สุ่มเลือก $\boldsymbol{X}$ มา 1 แผนการทดลอง ที่มีมิติ $n \times d$

กำหนดให้ $\boldsymbol{X}_{best} = \boldsymbol{X}$

และ $t = t_0$

ขั้นตอนที่ 3 กำหนดให้ $FLAG = 0$

และ $I = 1$

ขั้นตอนที่ 4 กำหนดให้ $\boldsymbol{X}_{try} = \boldsymbol{X}$

และสลับ 2 สมาชิกที่สุ่มเลือกมาจากสดมภ์ของ $\boldsymbol{X}_{try}$ ที่ถูกเลือกมาอย่างสุ่ม

ขั้นตอนที่ 5 ถ้า $\phi_p\left(\boldsymbol{X}_{try}\right) < \phi_p\left(\boldsymbol{X}\right)$

จะกำหนดให้ $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_{try}$

และ $FLAG = 1$

ถ้าเป็นกรณีอื่นคือ $e^{-\left[\phi_p(X_{try}) - \phi_p(X)\right]/t} = 1$

จะกำหนดให้ $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}_{try}$

และ $FLAG = 1$

ขั้นตอนที่ 6 ถ้า $\phi_p\left(\boldsymbol{X}_{try}\right) < \phi_p\left(\boldsymbol{X}_{best}\right)$

กำหนดให้ $\boldsymbol{X}_{best} = \boldsymbol{X}_{try}$

และ $I = 1$

ถ้าเป็นกรณีอื่น

$I = I + 1$

ขั้นตอนที่ 7 ถ้า $I < I_{MAX}$

กลับไปทำขั้นตอนที่ 4 ใหม่

ขั้นตอนที่ 8 ถ้า $FLAG = 1$

$t = t * FAC_t$

กลับไปทำขั้นตอนที่ 3 ใหม่

ขั้นตอนที่ 9 หยุดและรายงานค่า $\boldsymbol{X}_{best}$

จากขั้นตอนการทำงานของ SA ข้างต้น เนื่องจาก SA จะทำงานได้นั้นจะต้องมีการกำหนดค่าพารามิเตอร์ที่ดีที่สุดก่อน เพื่อให้ SA สามารถทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพ ซึ่งพารามิเตอร์ตั้งต้นที่ต้องกำหนดเพื่อให้ SA ทำงานได้ (Rungrattanaubol and Na-udom, 2007) มีดังต่อไปนี้

1.1 t_0 คืออุณหภูมิความเย็นเริ่มต้น (Initial cooling temperature)

$$t_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n}\left[\sum_{l=1}^{d}\left(X_i^{(l)} - X_j^{(l)}\right)^2\right]^{1/2}$$

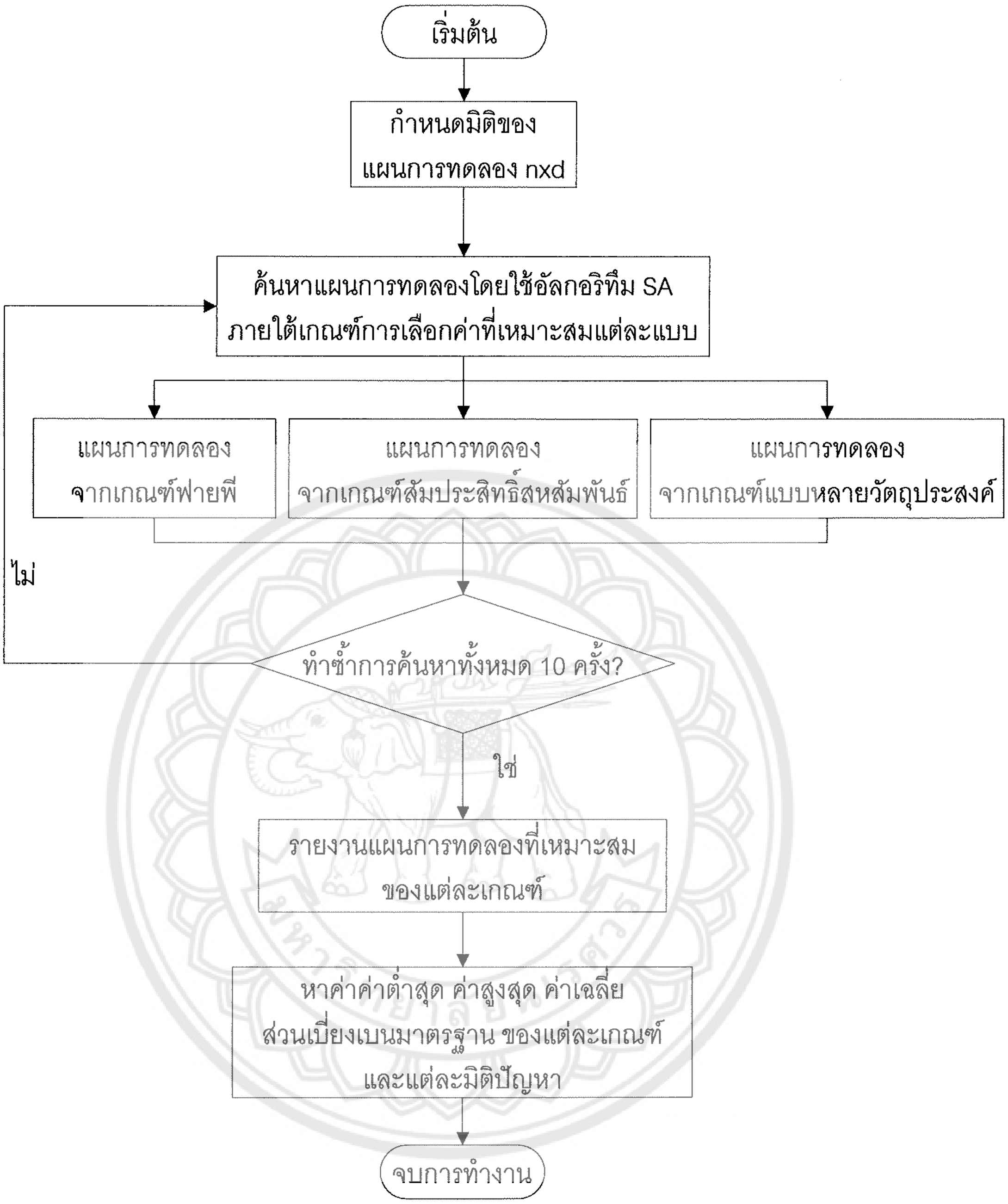
$$= \frac{\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n} d_{ij}}{n}$$

เมื่อ d_{ij} คือ ระยะทางแบบยุคลิด (Euclidean distance) ของสมาชิกในจุดทดลองที่ i และจุดทดลองที่ j ในเมทริกซ์ระยะทางแบบยุคลิด ซึ่งสมาชิกที่อยู่ด้านบนและด้านล่างของแนวทแยงมุมในเมทริกซ์ระยะทางแบบยุคลิดนั้นจะสมมาตรกัน ดังนั้นการวิจัยครั้งนี้จึงคำนวณระยะทางแบบยุคลิดโดยพิจารณาแค่สมาชิกที่อยู่ด้านบนของสมาชิกในแนว ทแยงมุมของเมทริกซ์ระยะทางแบบยุคลิดเท่านั้น

1.2 I_{MAX} คือจำนวนการสับเปลี่ยนที่มากที่สุดเพื่อค้นหาแผนการทดลองที่ดีขึ้นก่อนมีการลดอุณหภูมิ โดยที่ค่านี้จะต้องมากพอที่จะทำให้กลไกของ SA หลุดออกจากค่าที่ดีที่สุดในระดับกลุ่ม (Local minimum) ในการศึกษาครั้งนี้จะกำหนดให้ $I_{MAX} = 100$

1.3 FAC_t คืออัตราในการลดอุณหภูมิ ในการศึกษาครั้งนี้จะกำหนดให้ $FAC_t = 0.95$

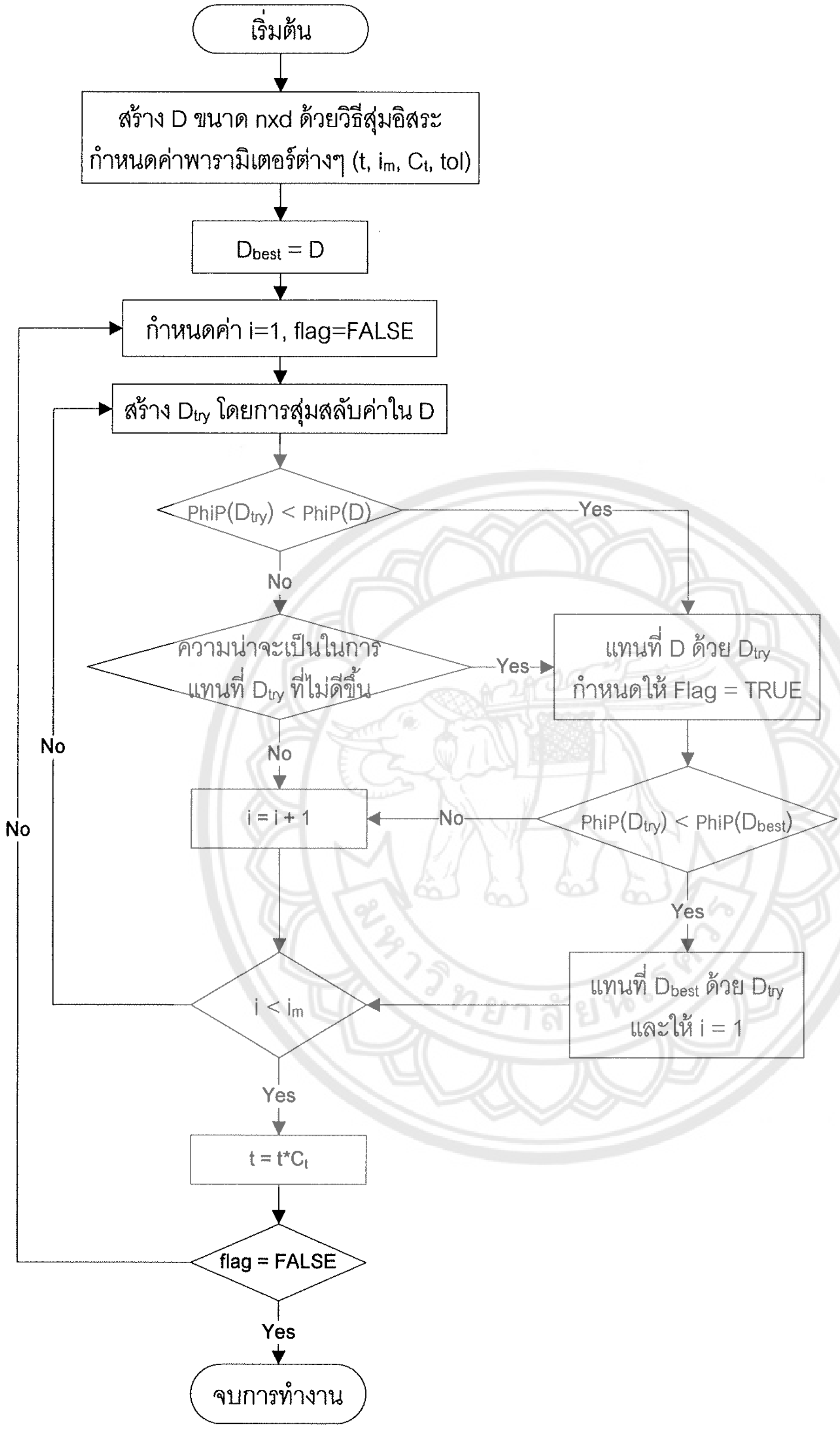
1.4 p แทนจำนวนเต็มบวก (Positive integer) ในการศึกษาครั้งนี้ผู้วิจัยกำหนดให้ $p = 5$



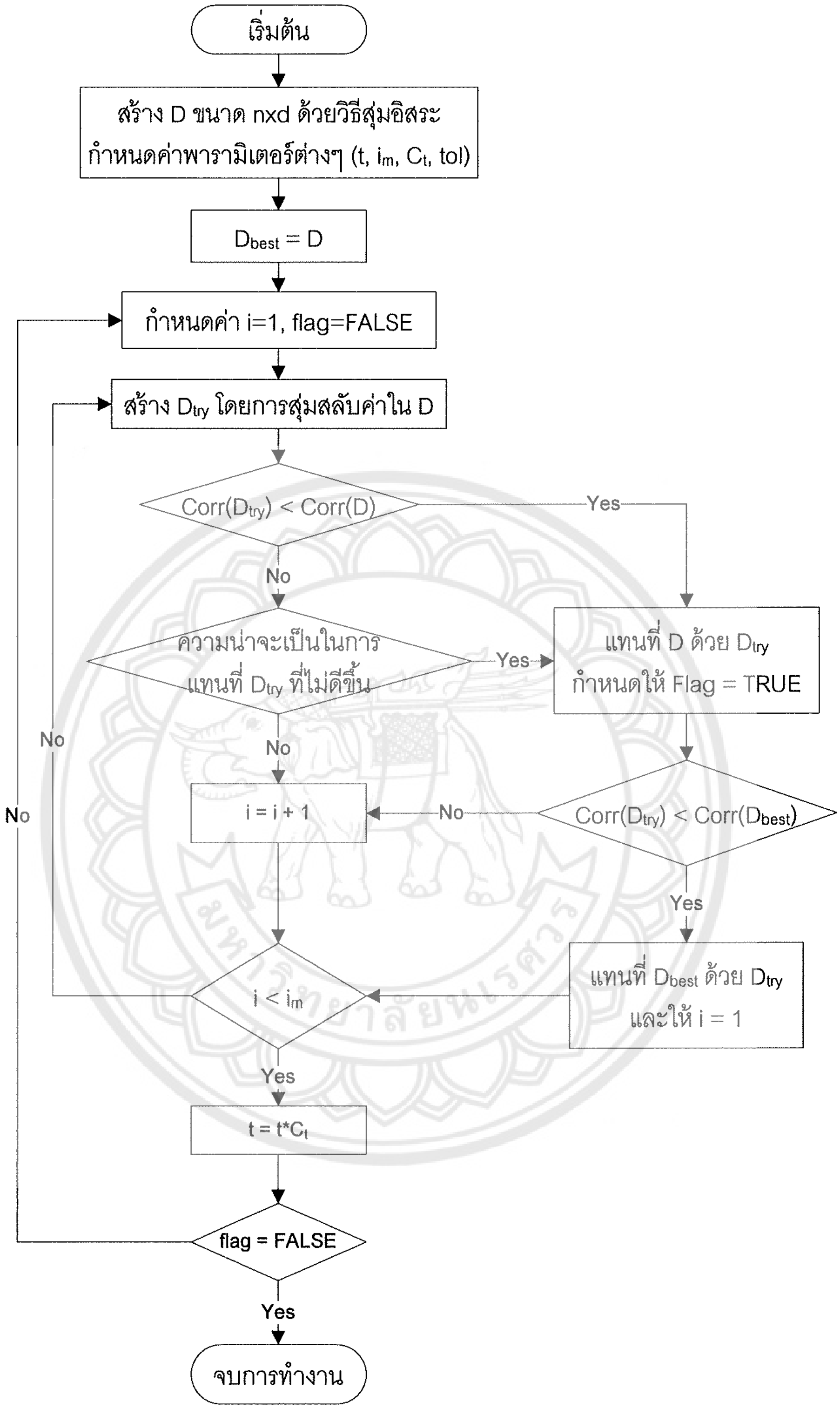
รูปที่ 3.2 ผังงานของขั้นตอนในการสร้างแผนการทดลองจากเกณฑ์ต่าง ๆ

จากรูปที่ 3.2 เป็นขั้นตอนในการดำเนินงานเพื่อสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสม ซึ่งจะเริ่มจากการกำหนดมิติปัญหาที่สนใจศึกษา แล้วทำการสร้างแผนการทดลอง 3 แบบ ได้แก่ แผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิจากเกณฑ์ฟายพี แผนการทดลองแบบเชิงตั้งฉากจากเกณฑ์สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ และแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิเชิงตั้งฉากจากเกณฑ์แบบหลายวัตถุประสงค์ ซึ่งแผนการทดลองแต่ละแบบนั้นจะทำการค้นหาซ้ำทั้งหมด 10 ครั้ง ในแต่ละมิติแผนการทดลอง แล้วนำค่าของเกณฑ์การเลือกค่าที่เหมาะสมจากแต่ละเกณฑ์มาหาค่าต่ำสุด ค่าสูงสุด ค่าเฉลี่ย และส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานเพื่อทำการวิเคราะห์แผนการทดลองที่ได้

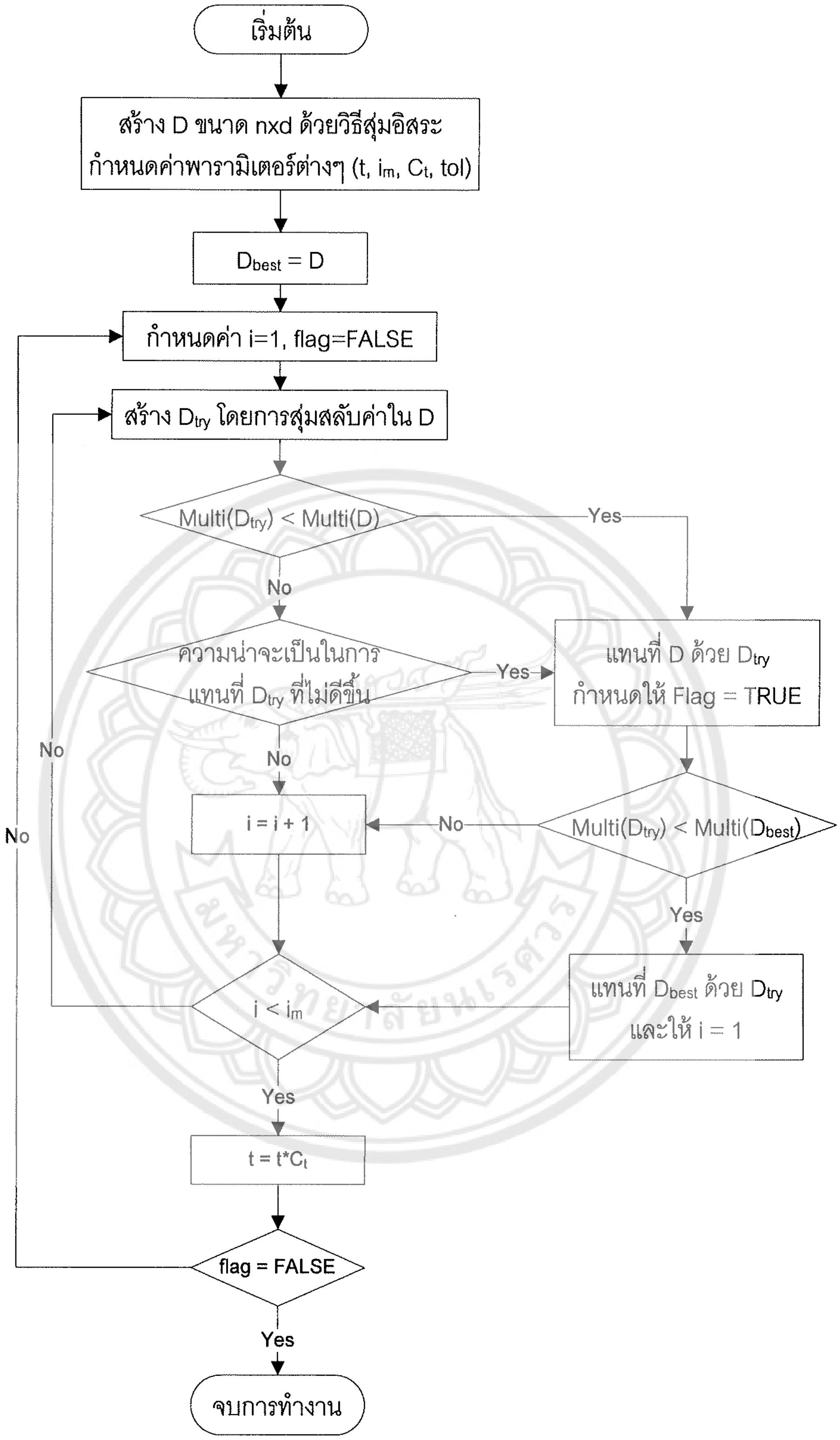
กระบวนการทำงานของอัลกอริทึมการสืบค้น SA ร่วมกับเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมทั้ง 3 เกณฑ์ สามารถแสดงเป็นผังงานได้ดังรูปที่ 3.3-3.5



รูปที่ 3.3 ผังงานการนำ SA มาพิจารณาร่วมกับเกณฑ์ฟายพี



รูปที่ 3.4 ผังงานการนำ SA มาพิจารณาร่วมกับเกณฑ์สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์



รูปที่ 3.5 ผังงานการนำ SA มาพิจารณาร่วมกับเกณฑ์หลายวัตถุประสงค์

3.3 เกณฑ์การเลือกค่าที่เหมาะสม (Optimality Criteria)

งานวิจัยนี้ใช้เกณฑ์แบบ ϕ_p ซึ่งถูกพัฒนามาจากเกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมแบบ Maximin distance criterion [7] โดยพิจารณาว่าแผนการทดลองที่ดีที่สุดนั้นต้องให้ค่า ϕ_p ที่ต่ำที่สุดเท่าที่เป็นไปได้ ยกตัวอย่างเช่น กรณีแผนการทดลอง X ใด ๆ จะสามารถคำนวณระยะทางระหว่างจุดทดลอง 2 จุดใด ๆ บนปริภูมิการทดลองโดยใช้ระยะทางแบบยูคลิดโดยใช้สมการ (3.1)

$$d(x_j, x_k) = [\sum_{i=1}^{d}(x_{ji} - x_{ki})^2]^{\frac{1}{2}} \tag{3.1}$$

หลังจากคำนวณระยะห่างครบทุกจุดการทดลองแล้ว จะได้เมทริกซ์ระยะห่างซึ่งเป็นเมทริกซ์จัตุรัสขนาด *n x n* ดังนี้

$$\begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1j} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2j} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{i1} & d_{i2} & \cdots & d_{ij} \end{bmatrix}$$

จากนั้นทำการเรียงระยะห่างระหว่างจุดทั้งหมดจากน้อยไปมาก $(d_1, d_2, \ldots, d_m)$ และสร้างดัชนี (Index) $(k_1, k_2, \ldots, k_m)$ โดยที่ j คือจำนวนของคู่จุดที่แบ่งตามระยะทาง d_j และคำนวณเกณฑ์ ϕ_p ได้โดยใช้สมการ (3.2)

$$\phi_p = \left[\sum_{j=1}^{m} k_j d_j^{-p}\right]^{\frac{1}{p}} \tag{3.2}$$

ต่อมา [9] ได้พัฒนาวิธีการคำนวณเกณฑ์ ϕ_p ให้ง่ายขึ้นโดยไม่ต้องนำค่าของ j_j มาเกี่ยวข้องและจะได้ผลลัพธ์ดังสมการ (3.3)

$$\phi_p = \left[\sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n} \frac{1}{(d_{ij})^p}\right]^{\frac{1}{p}} \tag{3.3}$$

โดยแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สุดคือแผนการทดลองที่ให้ค่า ϕ_p ต่ำที่สุด

ค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลอง (Mean of correlation between design columns)

การหาค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองคือ การหาค่าเฉลี่ยของสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเพียร์สัน (Pearson correlation coefficient) (Montgomery, Peck and Vinning, 2006, p. 107) นั่นเอง ซึ่งเป็นเกณฑ์ที่ใช้วัดความสัมพันธ์ของตัวแปรอิสระ ทีละคู่ในแต่ละสดมภ์ของแผนการทดลอง สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเพียร์สันจะมีค่าอยู่ระหว่าง 1 ถึง 1 สมาชิกในแนวทแยงมุมมีค่าเท่ากับ 1 สัญลักษณ์ที่ใช้คือ r และสูตรที่ใช้ใน การคำนวณคือ

$$r_{ij}=\frac{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{ui}-\overline{x}_{i}\right)\left(x_{uj}-\overline{x}_{j}\right)}{\sqrt{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{ui}-\overline{x}\right)^{2}}\sqrt{\sum_{u=1}^{n}\left(x_{uj}-\overline{x}_{j}\right)^{2}}} \tag{3.4}$$

เมื่อ r_{ij} คือ สัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเพียร์สันระหว่างสดมภ์ที่ i กับสดมภ์ที่ j

สำหรับแผนการทดลองที่ประกอบด้วยตัวแปรอิสระ d ตัว สหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองจะมีจำนวนทั้งหมด $\binom{d}{2}$ ค่า เมื่อได้ค่าของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของแผนการทดลองจำนวน $\binom{d}{2}$ ค่าแล้วจึงนำค่าที่ได้จากแต่ละครั้งมาเฉลี่ยกันและเมื่อพิจารณาคุณลักษณะของแผนการทดลองแบบ LHD จากค่าเฉลี่ยของสหสัมพันธ์ระหว่างสดมภ์ของ แผนการทดลอง แผนการทดลองใดที่มีค่าดังกล่าวเข้าใกล้ศูนย์มากที่สุดในมิติปัญหานั้น ๆ แสดงว่าแผนการทดลองดังกล่าวเป็นแผนการทดลองที่ดีที่สุด

งานวิจัยนี้จะใช้เกณฑ์ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ระหว่างคอลัมน์ของแผนการทดลอง (Correlation) ซึ่งพิจารณาแค่เงื่อนไข ค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ที่ได้เข้าใกล้ศูนย์โดยไม่สนใจว่าเป็นความสัมพันธ์ทางบวกหรือทางลบ เพื่อที่จะได้แผนการทดลองที่ครอบคลุม Space Design ให้ได้มากที่สุดตัวแปรแต่ละตัวจึงไม่ควรมีค่าสัมพันธ์กันเลย จึงเป็นที่มาของสมการหาค่าสัมประสิทธิ์สหสัมพันธ์ของเมทริกซ์ดังสมการที่ (3.5)

$$corr(D)=\sum_{i=1}^{d-1}\sum_{j=i+1}^{d}\frac{\left|cor\left(D[i],D[j]\right)\right|}{\binom{d}{2}} \tag{3.5}$$

โดยที่ D คือ เมทริกซ์ของ LHD ที่จะนำมาพิจารณา *i* และ *j* คือคอลัมน์ของเมทริกซ์ D ซึ่ง *i* จะเริ่มจาก 1 คือคอลัมน์แรกไปจนถึงคอลัมน์ที่ *d -1* นำมาหาค่าสหสัมพันธ์ (cor) กับคอลัมน์ j ที่จะเริ่มจากค่า i+1 ไปจนถึง d ซึ่งเป็นคอลัมน์สุดท้าย เมื่อหาค่าสหสัมพันธ์ของแต่ละคอลัมน์ได้แล้ว ก็นำค่าสหสัมพันธ์นั้นมาหาผลรวมทั้งหมดแล้วหารด้วยจำนวนวิธีจัดกลุ่ม $\binom{d}{2}$ จะได้เป็นค่าสหสัมพันธ์ของทั้งเมทริกซ์ แล้วพิจารณาว่า ถ้าค่าสหสัมพันธ์เข้าใกล้ 0 มากกว่าเดิม คือผลลัพธ์ที่ออกมาดีขึ้นเพราะแต่ละคอลัมน์จะมีความสัมพันธ์กันน้อยที่สุด

3.4 ตัวแบบทางสถิติที่เกี่ยวข้อง

3.4.1 ตัวแบบ Kriging

ตัวแบบ Kriging [6, 7, 19, 35, 38] ถูกนำมาใช้อย่างแพร่หลายในงานด้านการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ ซึ่ง ตัวแบบ Kriging สามารถเขียนแทนด้วยสมการที่ (3.6) ดังต่อไปนี้

$$y=\sum_{j=1}^{k}\beta_{j}f_{j}(x)+Z(x) \tag{3.6}$$

จากสมการที่ (3.6) จะเห็นได้ว่าค่าของตัวแปรตาม y สามารถหาได้จากฟังก์ชันพหุนาม (Polynomial function) รวมกับ $Z(x)$ ซึ่งหมายถึงความคลาดเคลื่อนที่อยู่ในรูปแบบของกระบวนการสโตแคสติก (Stochastic process) และนิยมใช้ กระบวนการของเกาส์เซียน (Gaussian process) ที่มีค่าเฉลี่ยเท่ากับ 0 และความแปรปรวนร่วมระหว่าง $Z(u)$ และ $Z(v)$ เท่ากับ $V(u,v)=\sigma^{2}R(u,v)$ เมื่อ σ^{2} แทนความแปรปรวนของกระบวนการสโตแคสติก และ $R(u,v)$ คือค่าสหสัมพันธ์ระหว่าง u และ v จากสมการที่ (3.6) จะเห็นได้ว่าการหาค่าประมาณของพารามิเตอร์ใน

ส่วนของ $Z(x)$ จะเกี่ยวข้องกับการหาพารามิเตอร์ของเมทริกซ์สหสัมพันธ์ (*R*) ซึ่งสามารถหาได้โดยการหาค่าสูงสุดของฟังก์ชัน ดังแสดงในสมการต่อไปนี้ [38]

$$-\frac{1}{2}(n\ln\hat{\sigma}^2+\ln\det R) \qquad (3.7)$$

เมื่อ $\hat{\sigma}^2$ แทนค่าประมาณความแปรปรวนของกระบวนการสโตแคสติก และ R แทน เมทริกซ์สหสัมพันธ์ของแต่ละรันในแผนการทดลอง การหาค่าประมาณของพารามิเตอร์ที่ดีที่สุดใน (3.6) อาศัยเทคนิคการหาค่าเหมาะสม (Optimization technique) ซึ่งเป็นที่ทราบกันดีว่าในกรณีที่มิติของปัญหามีค่าเพิ่มขึ้น จะต้องใช้เวลานานในการหาค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสม (Optimal value) นอกจากนี้ปัญหาที่พบบ่อยจากการหาค่าสูงสุดของสมการ (3.7) คือเมทริกซ์ *R* อาจเป็นเมทริกซ์ที่ไม่สามารถหาจ่าผกผันได้ (Singular matrix) ซึ่งจะส่งผลให้ประสิทธิภาพในการพยากรณ์ของตัวแบบ Kriging ลดลง

จากที่กล่าวมาข้างต้น จะเห็นได้ว่า การใช้แผนการทดลองแบบ LHD และตัวแบบ Kriging บางครั้งไม่ใช่เรื่องที่สามารถทำได้ง่ายหรือประสบผลสำเร็จเสมอไป เพื่อเป็นการหลีกเลี่ยงปัญหาที่เกิดขึ้น ผู้วิจัยจึงมีแนวคิดในการประยุกต์แผนการทดลองทางกายภาพควบคู่กับตัวแบบทางสถิติที่ใช้อย่างแพร่หลายคือ ตัวแบบพื้นผิวตอบสนอง (Response surface model: RSM) [1, 9, 23, 26, 36] และแผนการทดลองทางกายภาพที่จะนำมาศึกษาวิจัยประกอบไปด้วย Fractional factorial design (FFD), Central composite design (CCD) และแผนการทดลองเชิงตั้งฉากระหว่างสดมภ์ในแผนการทดลอง (Orthogonal array) [9, 14, 31] จากผลการวิจัยก่อนหน้าของผู้วิจัย ได้ข้อสรุปว่า การใช้ตัวแบบ RSM ควบคู่กับแผนการทดลองทางกายภาพ เช่น FFD สามารถใช้งานได้ดีในบางสถานการณ์และมีประสิทธิภาพใกล้เคียงกับ ตัวแบบ Kriging สำหรับบางมิติของปัญหาทดสอบเท่านั้น เมื่อจำนวนตัวแปรเข้าเพิ่มขึ้น ตัวแบบ RSM จะมีประสิทธิภาพด้อยกว่าตัวแบบ Kriging ในแง่ของความแม่นยำในการพยากรณ์ จากงานวิจัยก่อนหน้า [28, 31] ผู้วิจัยได้เสนอแนวคิดในการเพิ่มประสิทธิภาพของการพยากรณ์ของตัวแบบ RSM โดยประยุกต์ใช้หลักการปรับค่าความคลาดเคลื่อน (Error adjustment method on RSM: EARSM) โดยมีแนวคิดดังต่อไปนี้

จากกระบวนการ CSE ที่แสดงไว้ในสมการที่ (5.1) เราสามารถเขียนสมการเพื่อการประมาณได้ด้วยสมการ

$$\hat{y}=g(x) \qquad (3.8)$$

ซึ่งจะได้ว่า

$$y=g(x)+\varepsilon \qquad (3.9)$$

เมื่อ $g(x)$ แทนรูปแบบของตัวแบบทางสถิติใด ๆ เช่นตัวแบบ Kriging หรือ ตัวแบบ RSM และ $x=(x_1,x_2,...,x_d)$ แทนเวคเตอร์ของค่าตัวแปรเข้า และ ε แทนความคลาดเคลื่อนที่มีการแจกแจงแบบ $NID(0,\sigma^2)$ รูปแบบของตัวแบบ RSM ที่จะนำมาประยุกต์ใช้ในงานวิจัยนี้ จัดอยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันพหุนามกำลังสอง (Second order polynomial model) ดังสมการต่อไปนี้

$$\hat{y}(x)=\beta_0+\sum_{i=1}^{d}\beta_i x_i+\sum_{i=1}^{d}\beta_{ii}x_i^2+\sum_{i=1}^{d}\sum_{i<j}^{d}\beta_{ij}x_i x_j \qquad (3.10)$$

เมื่อ $\beta_i,\beta_{ii},\beta_{ij}(i<j=1,2,...,d)$ เป็นค่าพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่าและสามารถประมาณได้จากข้อมูลที่เก็บรวบรวมมาจากการทดลอง

ถึงแม้ว่าตัวแบบ Kriging จะได้รับความนิยมอย่างกว้างขวาง แต่การประมาณค่าพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่าต่างๆ ในตัวแบบ Kriging มีความซับซ้อนมาก และบางครั้งไม่สามารถหาค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสมได้ ซึ่งจะทำให้ความแม่นยำในการพยากรณ์ต่ำ นอกจากตัวแบบ Kriging แล้ว ยังมีตัวแบบทางสถิติแบบอื่นที่สามารถนำมาใช้ในการ

พยากรณ์ได้ ซึ่งในการศึกษาครั้งนี้ได้เลือก Radial basis function มาศึกษา รายละเอียดของตัวแบบ Radial basis function เพื่อเปรียบเทียบความแม่นยำในการพยากรณ์กับ RSM และตัวแบบ Kriging

3.4.2 ตัวแบบ Radial basis function

Radial basis function (RBF) เป็นตัวแบบเพื่อการพยากรณ์อีกวิธีการหนึ่งที่มีหลักการคล้ายกับ ตัวแบบทางสถิติอื่น ๆ แต่จะแตกต่างกันตรงที่ RBF จะใช้ฟังก์ชันฐานหลัก ซึ่งเป็นได้ทั้งแบบเชิงเส้นและไม่เชิงเส้น สำหรับความแม่นยำในการพยากรณ์ของ RBF ขึ้นอยู่กับการเลือกฟังก์ชันฐานหลักที่จะใช้กับกลุ่มตัวอย่างข้อมูล RBF ถูกนำมาใช้อย่างกว้างขวางในการสร้างพื้นผิวตอบสนองและแบบจำลองสำหรับกลุ่มตัวอย่างที่มีขนาดใหญ่ นั่นคือ RBF เป็นเทคนิคสำหรับการประมาณค่าในช่วงที่แม่นยำของข้อมูลในหลายมิติและนิยมประยุกต์ใช้กับจุดทดลองที่มีขนาดใหญ่ซึ่ง RBF สร้างจากรูปแบบที่เสนอโดย Fang and Horstemeyer [8]

$$y(x)=\sum_{i=1}^{n}\beta_i\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right) \tag{3.11}$$

ซึ่ง n คือ จำนวนจุดทดลอง

$\boldsymbol{x}$ คือ เวกเตอร์ของตัวแปรเข้าในแผนการทดลอง

$\boldsymbol{x}_i$ คือ เวกเตอร์ของตัวแปรเข้าในแผนการทดลองที่จุดทดลองที่ i เมื่อ $i=1,2,\ldots,n$

$\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|$ คือ นอร์มแบบยุคลิด

ϕ คือ ฟังก์ชันฐานหลัก

β_i คือ สัมประสิทธิ์สำหรับฟังก์ชันฐานหลักที่ i เมื่อ $i=1,2,\ldots,n$

การประมาณค่าฟังก์ชัน $y(x)$ เป็นการรวมกันเชิงเส้นของฟังก์ชันฐานหลักของ RBF กับสัมประสิทธิ์ถ่วงน้ำหนัก ซึ่งฟังก์ชันฐานหลักที่ใช้กันโดยทั่วไป แสดงดังตาราง 1 [8]

ตาราง 1 แสดงตัวอย่างฟังก์ชันฐานหลัก

ชื่อ	ฟังก์ชันฐานหลัก
Gaussian	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=e^{-c\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|^2},0<c\le 1$
Multiquadric	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=\sqrt{\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|^2+c^2},0<c\le 1$
Inverse multiquadric	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=\dfrac{1}{\sqrt{\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|^2+c^2}},0<c\le 1$
Thin-plate spline	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|^2\ln\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)$
Linear	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|$
Cubic	$\phi\left(\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|\right)=\left\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i\right\|^3$

สำหรับการศึกษาในครั้งนี้เลือกใช้ฟังก์ชันฐานหลักที่เป็นที่นิยมใช้มากที่สุด นั่นคือ Gaussian Multiquadric และ Thin-plate spline เนื่องจากฟังก์ชันฐานหลักแบบ Gaussian และ Multiquadric สามารถปรับแก้พารามิเตอร์ c ได้ และยังสามารถใช้ในการปรับการประมาณค่าให้เกิดความแม่นยำมากขึ้น [1] ส่วนฟังก์ชันฐานหลักแบบ Thin-plate spline จะสามารถสร้างตัวแบบที่สามารถพยากรณ์ได้แม่นยำสำหรับแผนการทดลองที่มีมิติขนาดใหญ่

จากสมการ (8.8) สามารถแทนค่า $\boldsymbol{x}$ และ $y(\boldsymbol{x})$ ในรูปแบบของ n เวกเตอร์ของจุดทดลองในแผนการทดลองได้ดังนี้

$$
\begin{aligned}
y(\boldsymbol{x}_1) &= \sum_{i=1}^{n} \beta_i \phi\left(\left\|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_i\right\|\right) \\
y(\boldsymbol{x}_2) &= \sum_{i=1}^{n} \beta_i \phi\left(\left\|\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_i\right\|\right) \\
&\ \vdots \\
y(\boldsymbol{x}_n) &= \sum_{i=1}^{n} \beta_i \phi\left(\left\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}_i\right\|\right)
\end{aligned} \tag{3.12}
$$

จากสมการ (3.12) สามารถเขียนในรูปเมทริกซ์ ได้เป็น

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A\beta} \tag{3.13}$$

ซึ่ง $\boldsymbol{y} = \left[y(\boldsymbol{x}_1), y(\boldsymbol{x}_2), \ldots, y(\boldsymbol{x}_n)\right]^T$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{โดยที่} \quad A_{i,j} = \phi\left(\left\|\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j\right\|\right),\ i, j = 1, 2, \ldots, n$$

$$\boldsymbol{\beta} = \left[\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n\right]^T$$

สำหรับพารามิเตอร์ $\boldsymbol{\beta}$ สามารถคำนวณโดยใช้วิธีกำลังสองน้อยที่สุด ดังสมการ

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}\right)^{-1} \boldsymbol{Ay} \tag{3.14}$$

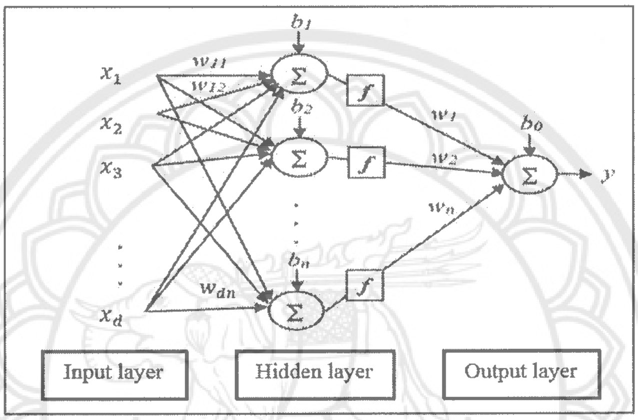
$\hat{\boldsymbol{\beta}}$ ที่หาได้จากสมการ (3.14) สามารถใช้ในการประมาณค่าตัวแปรตามในกลุ่มข้อมูลที่ไม่ได้ทำการทดลองหรือจุดพยากรณ์

ตัวแบบ Artificial Neural Network

เทคนิคการพยากรณ์ที่นำมาศึกษาในโครงการวิจัยนี้คือตัวแบบโครงข่ายประสาทเทียม (Artificial Neural Networks หรือ ANN) เป็นวิธีการที่ให้เครื่องเรียนรู้จากตัวอย่างต้นแบบ แล้วฝึก (Train) ให้ระบบได้รู้จักที่จะคิดแก้ปัญหาที่กว้างขึ้นได้ แนวคิดเริ่มต้นของเทคนิคนี้ได้มาจากการศึกษาโครงข่ายไฟฟ้าชีวภาพ (Bioelectric network) ในสมอง ซึ่งประกอบด้วยเซลล์ประสาท (Neurons) และ จุดประสานประสาท (Synapses) ตามโมเดลนี้ ข่ายงานประสาทเกิดจากการเชื่อมต่อระหว่างเซลประสาท จนเป็นเครือข่ายที่ทำงานร่วมกัน

โครงสร้างของนิวรอลเน็ตจะประกอบด้วยโหนดสำหรับ ข้อมูลนำเข้า (Input value) และ ผลลัพธ์ (Output value) การประมวลผลจะกระจายอยู่ในโครงสร้างเป็นชั้น ๆ ได้แก่ ชั้นข้อมูลเข้า (Input layer) ชั้นข้อมูลออก (Output layer) และ ชั้นข้อมูลซ่อน (Hidden layers) มีการกำหนดค่าน้ำหนัก (Weight) ให้แก่เส้นทางนำเข้าของข้อมูลนำเข้าแต่ละตัว การประมวลผลของนิวรอลเน็ตจะอาศัยการส่งการทำงานผ่านโหนดต่าง ๆ ในชั้น (Layer) เหล่านี้ ในการเรียนรู้ของโครงข่ายประสาทเทียม จะอาศัยอัลกอริทึมการแพร่ย้อนกลับ (Back-propagation Algorithm) ในการสร้างการเรียนรู้สำหรับโครงข่ายประสาทเทียม เพื่อให้มีความคิดเสมือนมนุษย์

ชั้นเครือข่าย (Network Layer) เป็นหนึ่งในสถาปัตยกรรมของโครงข่ายประสาทเทียม โดยที่ชั้นเครือข่ายจะประกอบด้วย 3 ชั้น ได้แก่ โหนดข้อมูลเข้า (Input Node) โหนดข้อมูลซ่อน (Hidden Node) และ โหนดข้อมูลออก (Output Node)



รูปที่ 1: แสดงโครงสร้างของชั้นเครือข่าย (Network Layer)

- การทำงานของโหนดข้อมูลเข้า จะทำหน้าที่แทนส่วนของข้อมูลดิบ ที่จะถูกป้อนเข้าสู่เครือข่าย
- การทำงานของแต่ละโหนดข้อมูลซ่อนจะถูกกำหนดโดยการทำงานของโหนดข้อมูลเข้า และค่าน้ำหนักบนความสัมพันธ์ระหว่าง โหนดข้อมูลเข้า และ โหนดข้อมูลซ่อน
- พฤติกรรมการทำงานของโหนดข้อมูลออก จะขึ้นอยู่กับการทำงานของโหนดข้อมูลซ่อน และ ค่าน้ำหนักระหว่างโหนดข้อมูลซ่อน และ โหนดข้อมูลออก

ประเภทของเครือข่ายนี้เราสามารถกำหนดการแทนค่าให้แก่ โหนดข้อมูลเข้าได้อย่างอิสระ ค่าน้ำหนักระหว่างโหนดข้อมูลเข้า และ โหนดข้อมูลซ่อนจะถูกกำหนดเมื่อโหนดข้อมูลซ่อนกำลังทำงาน ฉะนั้นเวลาที่แก้ไขค่าน้ำหนักโหนดข้อมูลซ่อนจะสามารถเลือกว่าอะไรคือค่าที่เราแทนเข้ามา

สามารถจำแนกออกเป็น 2 ประเภท คือ โครงข่ายแบบชั้นเดียว (Single-layer perceptron) และโครงข่ายแบบหลายชั้น (Multi-layer perceptron)

1) โครงข่ายแบบชั้นเดียว (Single-layer perceptron) เป็นโครงข่ายประสาทเทียมอย่างง่ายที่มีเพียงชั้นรับข้อมูลป้อนเข้า และชั้นส่งข้อมูลออกเท่านั้น โหนดในชั้นรับข้อมูลป้อนเข้าทำหน้าที่รับข้อมูลเข้า แล้วส่งข้อมูลผ่านเส้นเชื่อโยงต่างๆ ไปให้โหนดในชั้นส่งข้อมูลออก ความเข้มของสัญญาณ หรือ ปริมาณข้อมูลที่นำเข้าสู่โหนดในชั้นส่งข้อมูลออกจะขึ้นอยู่กับค่าน้ำหนักที่อยู่บนเส้นเชื่อมโยง

โหนดในชั้นส่งข้อมูลออกจะนำข้อมูลที่ได้รับมาคำนวณโดยใช้ฟังก์ชันทางคณิตศาสตร์ที่เรียกว่า ฟังก์ชันการแปลง (Transfer function) ที่เหมาะสมกับปัญหา แล้วส่งผลลัพธ์ที่ได้ออกมาเป็นข้อมูลส่งออก ถ้า ผลลัพธ์ที่ต้องการเป็น “ใช่” หรือ “ไม่ใช่” เราจะต้องใช้ Threshold function

$$f(x) = \begin{cases} 1 \ if \ x \geq T \\ 0 \ if \ x < T \end{cases}, T = Threshold\ level \tag{3.15}$$

หรือ ผลลัพธ์เป็นค่าตัวเลขที่ต่อเนื่อง เราต้องใช้ฟังก์ชันต่อเนื่อง เช่น Sigmoid function

$$f(x) = \frac{1}{1+ e^{-\alpha x}} \tag{3.16}$$

โครงข่ายแบบหลายชั้น (Multi-layer perceptron) เป็นโครงข่ายที่มีชั้นแอบแฝง (Hidden layer) ตั้งแต่ 1 ชั้นขึ้นไป โครงข่ายแบบหลายชั้นจะใช้ในกรณีที่ปัญหามีความซับซ้อน ซึ่งโครงข่ายแบบชั้นเดียวไม่สามารถแก้ปัญหาได้ จึงเพิ่มจำนวนโหนดที่มีการคำนวณ หรือชั้นแอบแฝงให้กับโครงข่าย ตัวอย่างของโครงข่ายแบบหลายชั้น เช่น การแพร่ย้อนกลับ (Back propagation) การทำ Self-organizing maps และ Counter propagation

บทที่ 4

ผลการวิจัย

เนื้อหาในบทนี้ จะแสดงผลที่ได้จากการวิจัย โดยพิจารณาแผนการทดลองที่เหมาะสมที่สร้างจากอัลกอริทึมการสืบค้นภายใต้เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมดังที่ได้นำเสนอไปแล้วในบทที่ 3 รวมทั้งแสดงความแม่นในการพยากรณ์ของตัวแบบทางสถิติ 3 ตัวแบบ เมื่อพิจารณามิติปัญหาที่แตกต่างกัน ดังรายละเอียดต่อไปนี้

ตารางที่ 1 แสดงปัญหาทดสอบที่ใช้ในการศึกษานี้ ซึ่งประกอบด้วยปัญหาที่เป็นแบบไม่เชิงเส้น โดยมีจำนวนตัวแปรอิสระตั้งแต่ 2 ถึง 10 ตัวแปร

ตารางที่ 1 แสดงรายละเอียดของปัญหาทดสอบต่าง ๆ

Problen	*d*	*Function*
Branin function	2	$y=\left(x_2-\frac{5.1}{4\pi^2}x_1^2+\frac{5}{\pi}x_1-6\right)^2+10\left(1-\frac{1}{8\pi}\right)\cos(x_1)+10, -5\le x_1\le 10, 0\le x_2\le 15$
Welch function	2	$y=[30+x_1\sin(x_1)](4+e^{-x_2}), 0\le x_1, x_2\le 5$
2Dfunction	2	$y=\sin(x_1+x_2)+(x_1+x_2)^2-1.5x_1+2.5x_2+1, -1.5\le x_1\le 4, -3\le x_2\le 3$
3Dfunction	3	$y=(x_1-x_2)^2+(x_2+x_3)^4, -10\le x_1, x_2, x_2\le 10$
Pressure vessel function	4	$y=0.6244x_1x_2x_3+1.7781x_4x_1^2+3.1661x_3^2x_{2+19.84}x_3^2x_1$ $25\le x_1\le 150, -1.5\le x_2\le 240, 1\le x_3\le 1.375, 0.625\le x_4\le 1$
Cyclone model	7	$y=174.42\left(\frac{x_1}{x_5}\right)\left(\frac{x_3}{x_2-x_1}\right)^{0.85}\sqrt{\frac{1-2.62\{1-0.36(x_4/x_2)^{-0.56}\}^{3/2}(x_4/x_2)^{1.16}}{x_6x_7}}$ $0.09\le x_1, x_3, x_4\le 0.11, 0.27\le x_2\le 0.33, 1.35\le x_5\le 1.65, 14.4\le x_6\le 17.6,$ $0.675\le x_7\le 0.825$
Borehole function	8	$y=\dfrac{2\pi x_3(x_4-x_6)}{\ln\left(\frac{x_2}{x_1}\right)\left[1+\dfrac{2x_7x_3}{\ln\left(\frac{x_2}{x_1}\right)x_1^2x_8}+\dfrac{x_3}{x_5}\right]}$ $0.05\le x_1\le 0.15, 100\le x_2\le 50000, 63070\le x_3\le 115600, 990\le x_4\le 1110,$ $63.1\le x_5\le 116, 700\le x_6\le 820, 1120\le x_7\le 1680, 9855\le x_8\le 12045$
9Dfunction	9	$y=0.28285+\sum_{i=1}^{9}\left[\frac{3}{10}+\sin\left(\frac{16}{15}x_i-1\right)+\sin^2\left(\frac{16}{15}x_i-1\right)\right], -1\le x_i\le 1, i=1,2,\dots,9$
10Dfunction	10	$y=\sum_{i=1}^{10}\left[\frac{3}{10}+\sin\left(\frac{16}{15}x_i-1\right)+\sin^2\left(\frac{16}{15}x_i-1\right)\right], -1\le x_i\le 1, i=1,2,\dots,10$

เมื่อสร้างแผนแบบทดลองภายใต้เกณฑ์การเลือกค่าเหมาะสมแบบต่าง ๆ แล้ว จึงนำแผนการทดลองจำนวน 10 แผนการทดลองจากแต่ละมิติของปัญหาไปสร้างตัวแบบการพยากรณ์ทั้ง 3 ตัวแบบ จากนั้นวัดค่าความแม่นยำในการพยากรณ์ โดยใช้ค่า RMSE ค่า PI ได้ผลดังตารางต่อไปนี้

ตาราง 2: ค่า RMSE จากกรณีจำนวนตัวแปรอิสระขนาดเล็ก (2 ถึง 4 ตัวแปร)

Test problem	Model	RMSE					
		Small design runs			Large design runs		
		Mean	S.D.	PI	Mean	S.D.	PI
Branin function	Kriging	47.1271	5.2903		**31.3229**	9.9980	
	RBFG	**45.6944**	5.5329	3.0401	31.6707	10.4940	-1.1104
	RBFM	47.5957	5.1250	-0.9943	36.0136	8.3319	-14.9753
	ANN	60.4779	1.7443	-28.3393	57.7944	0.6217	-84.5117
Welch function	Kriging	5.4923	0.8081		**3.8542**	0.4973	
	RBFG	**5.1697**	1.3390	5.8737	4.2097	0.1754	-9.2237
	RBFM	7.7868	1.2069	-41.7767	5.2123	0.1833	-35.2369
	ANN	9.0204	0.4977	-64.2372	8.4931	0.1942	-120.3696
2Dfunction	Kriging	2.5953	0.1537		2.0243	0.0118	
	RBFG	**1.0280**	0.1132	60.3899	**1.0470**	0.0353	48.2784
	RBFM	3.6987	0.1901	-42.5152	2.6945	0.1185	-33.1077
	ANN	6.8755	0.8220	-164.9212	7.1676	1.0979	-254.0780
3Dfunction	Kriging	26534.58	3374.39		26383.05	2028.55	
	RBFG	**21999.53**	3115.03	17.0911	22924.04	1472.21	13.1107
	RBFM	33836.69	2091.95	-27.5192	29550.92	1844.84	-12.0072
	ANN	29558.61	12579.78	-11.3966	**22565.18**	12012.91	14.4709
Pressure vessel function	Kriging	**944.196**	252.276		**59.657**	17.063	
	RBFG	7938.058	2435.184	-740.7214	12474.46	7191.75	-20810.304
	RBFM	5131.494	425.947	-443.4776	4693.200	192.404	-7766.9729
	ANN	1146.302	393.592	-21.4051	1093.946	70.960	-1733.7261

ตารางที่ 3 แสดงค่า RMSE ที่ได้จากกรณีมิติของปัญหามีขนาดเล็ก โดยแบ่งขนาดของจุดทดลองเป็น 2 ระดับ ได้แก่ขนาดเล็กและขนาดใหญ่ กรณี 2 ตัวแปร จะเห็นว่าสำหรับ Branin และ Welch function กรณีที่จำนวนจุดทดลองขนาดเล็ก ค่า RMSE ที่ได้จากตัวแบบ RBF มีค่าต่ำที่สุด และมีประสิทธิภาพดีกว่าตัวแบบ Kriging ประมาณ 3.041% และประมาณ 5.8737% สำหรับ Branin function ซึ่งแสดงให้เห็นว่ากรณีมิติปัญหาขนาดเล็ก ตัวแบบ RBF มีประสิทธิภาพเหนือกว่าตัวแบบ Kriging เล็กน้อย เมื่อพิจารณากรณีที่จำนวนจุดทดลองมีขนาดใหญ่ พบว่าตัวแบบ Kriging มีความแม่นยำในการพยากรณ์สูงกว่าตัวแบบ RBF (PI = -1.1104% and -9.2237%) ส่วนกรณีที่ความซับซ้อนของปัญหามากขึ้น ตัวแบบ RBF มีประสิทธิภาพที่คงเส้นคงวามากกว่าอีก 2 ตัวแบบ ไม่ว่าจำนวนจุดทดลองจะมีขนาดเล็กหรือใหญ่ก็ตาม

กรณีที่มิติของปัญหาทดสอบเป็น 3 ตัวแปร จะเห็นว่าตัวแบบ RBF จะมีความแม่นยำในการพยากรณ์มากกว่าตัวแบบอื่น ๆ โดยเฉพาะอย่างยิ่งเมื่อจำนวนจุดทดลองมีขนาดเล็ก แต่เมื่อจำนวนจุดทดลองมีขนาดใหญ่ พบว่าตัวแบบ ANN มีความแม่นยำมากที่สุด ส่วนกรณีจำนวนตัวแปรอิสระเท่ากับ 4 ตัว พบว่าตัวแบบ Kriging มีความแม่นยำมากที่สุด นอกจากนี้เมื่อพิจารณาค่าส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานจากตัวแบบ Kriging จะเห็นว่ามีค่าต่ำ แสดงให้เห็นว่าตัวแบบ

ดังกล่าวมีความแกร่งและเหมาะสมในการพยากรณ์ ดังนั้น จึงสามารถสรุปได้ว่า ตัวแบบ RBF และตัวแบบ Kriging มีความเหมาะสมสำหรับมิติปัญหาที่มีขนาดเล็ก

ตารางที่ 3 แสดงค่า RMSE และค่า PI ในกรณีที่มิติของปัญหามีขนาดกลาง (7 - 8 ตัวแปร) ผลที่ได้แสดงให้เห็นว่าตัวแบบ Kriging มีความเหมาะสมสำหรับ Cyclone model และ Borehole ในกรณีที่จำนวนจุดทดลองขนาดเล็ก เมื่อพิจารณาค่า PI จะพบว่าตัวแบบ Kriging ให้ค่าที่ติดลบค่อนข้างมาก ซึ่งแสดงให้เห็นว่าตัวแบบ Kriging มีประสิทธิภาพเหนือกว่าตัวแบบอื่น ๆ ส่วนกรณีที่จำนวนจุดทดลองขนาดใหญ่ จะได้ว่าค่า RMSE ที่ได้จากตัวแบบ ANN ให้ค่าต่ำที่สุด ดังนั้น ตัวแบบ ANN เป็นตัวแบบที่เหมาะสมที่จะนำไปใช้ในการพยากรณ์ค่าตัวแปรตอบสนองที่ได้จากการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์

ตาราง 3: RMSE values for medium dimensions (7 and 8 input variables)

Test problem	Model	RMSE Small design runs Mean	S.D.	PI	Large design runs Mean	S.D.	PI
Cyclone model	Kriging	**0.0047**	0.0006		0.0043	0.0003	
	RBFG	0.0590	0.0102	-1155.3191	0.0118	0.0021	-174.4186
	RBFM	0.0630	0.0072	-1240.4255	0.0528	0.0037	-1127.9070
	ANN	0.0103	0.0014	-119.1489	**0.0041**	0.0006	4.6512
Borehole function	Kriging	**0.9489**	0.1057		0.8395	0.1398	
	RBFG	5.0671	0.3419	-433.9973	2.8965	0.2859	-245.0268
	RBFM	5.5991	0.4146	-490.0622	3.2099	0.1541	-282.3585
	ANN	2.0457	0.6200	-115.5865	**0.7845**	0.0801	6.5515

ตารางที่ 4 แสดงผลที่ได้จากกรณีที่มิติของปัญหาทดสอบมีขนาดใหญ่ (9 และ 10 ตัวแปร) ซึ่งจะเห็นได้ว่าตัวแบบ RBFM มีความแม่นยำในการพยากรณ์สูงสุด ทั้งในกรณีที่จำนวนจุดทดลองขนาดเล็กและขนาดใหญ่

ตาราง 4: RMSE values for large dimensions (9 and 10 input variables)

Test problem	Model	RMSE Small design runs Mean	S.D.	PI	Large design runs Mean	S.D.	PI
9Dfunction	Kriging	0.2745	0.0140		0.2416	0.0058	
	RBFG	0.3588	0.0265	-30.7104	0.3021	0.0167	-25.0414
	RBFM	**0.2365**	0.0042	13.8434	**0.2237**	0.0040	7.4089
	ANN	0.2517	0.0100	8.3060	0.2425	0.0055	-0.3725
10Dfunction	Kriging	0.2966	0.0130		0.2548	0.0073	
	RBFG	0.3803	0.0151	-28.2198	0.3198	0.0195	-25.5102
	RBFM	**0.2498**	0.0055	15.7788	**0.2346**	0.0033	7.9278
	ANN	0.2741	0.0082	7.5860	0.2612	0.0105	-2.5118

บทที่ 5

สรุปผลการวิจัย

การวิจัยครั้งนี้มีจุดมุ่งหมายเพื่อนำเสนอวิธีการหาค่าเหมาะสมเพื่อออกแบบแผนแบบทดลองสำหรับใช้ในงานด้านการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ โดยพิจารณาคุณสมบัติการเติมเต็มปริภูมิควบคู่กับคุณสมบัติเชิงตั้งฉาก จากนั้นวัดประสิทธิภาพของวิธีการที่นำเสนอโดยพิจารณาคุณสมบัติของแผนการทดลองที่สร้างได้ รวมไปถึงความแม่นยำในการพยากรณ์ของตัวแบบที่สร้างจากแผนการทดลองแบบต่าง ๆ เพื่อหาข้อสรุปและข้อเสนอแนะในการเลือกใช้วิธีในการสร้างแผนการทดลองที่เหมาะสมสำหรับ CSE ให้มีประสิทธิภาพมากยิ่งขึ้น

สรุปผลการวิจัย

จากการศึกษาภายใต้สถานการณ์ต่าง ๆ ทำให้ได้ข้อสรุปดังต่อไปนี้

1. การหาค่าเหมาะสมในการออกแบบการทดลองที่เน้นคุณสมบัติการเติมเต็มปริภูมิและการตั้งฉากจะส่งให้สามารถออกแบบการทดลองสำหรับการจำลองการทดลองด้วยคอมพิวเตอร์ได้ดี
2. ผลที่ได้จากการเปรียบเทียบความแม่นยำของตัวแบบพยากรณ์ 3 แบบ โดยใช้ค่า RMSE ที่ได้แสดงในตารางที่ 2 - 4 พบว่า ตัวแบบทางสถิติทั้ง 3 ตัวแบบมีประสิทธิภาพในการพยากรณ์ใกล้เคียงกัน โดยที่ ตัวแบบ RBF จะมีความเหมาะสมในกรณีมิติของปัญหาขนาดเล็ก และลักษณะของปัญหามีความซับซ้อนน้อย ส่วนกรณีที่ปัญหามีความซับซ้อนมาก ตัวแบบ Kriging จะมีประสิทธิภาพดีที่สุด อย่างไรก็ตามสำหรับปัญหามิติขนาดกลางที่มีความซับซ้อน ตัวแบบ ANN จะมีประสิทธิภาพมากที่สุด โดยเฉพาะอย่างในกรณีที่จำนวนจุดทดลองมีขนาดใหญ่ ส่วนในกรณีที่มิติปัญหามีขนาดใหญ่ขึ้น จะได้ว่าตัวแบบทั้ง 3 ตัวมีประสิทธิภาพใกล้เคียงกัน โดยที่ตัวแบบ RBF มีความแม่นยำสูงกว่าเล็กน้อย

อภิปรายผล

ในการออกแบบแผนแบบทดลองที่เหมาะสมนั้น แผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิเชิงตั้งฉากที่ได้มานั้นมีค่าฟายพีไม่ต่างจากแผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิมากนัก และมีค่าสัมประสิทธ์สหสัมพันธ์ต่างจากแผนการทดลองเชิงตั้งฉากเล็กน้อย ทำให้แผนการทดลองแบบเติมเต็มปริภูมิเชิงตั้งฉากที่ได้มานั้นมีคุณสมบัติของแผนการทดลองที่ดีทั้งสองแบบ

ในส่วนของการพัฒนาตัวแบบพยากรณ์นั้น ผู้วิจัยได้ตั้งสมมติฐานเอาไว้ว่า ตัวแบบ ANN ซึ่งเป็นตัวแบบที่ค่อนข้างยืดหยุ่น และมีประสิทธิภาพสำหรับกรณีจำนวนจุดทดลองขนาดใหญ่ ซึ่งผลการทดลองที่ได้ก็มีแนวโน้มค่อนข้างใกล้เคียงกับสมติฐานที่ได้ตั้งเอาไว้พอสมควร และผู้วิจัยคาดว่าถ้าทำการทดลองสร้างตัวแบบพยากรณ์จากมิติปัญหาขนาดอื่นๆ ผลการทดลองที่ได้จะได้มีความชัดเจนมากยิ่งขึ้น

ข้อจำกัดของงานวิจัย

เนื่องจากงานวิจัยนี้ได้ทดสองการสร้างตัวแบบพยากรณ์กับบางมิติปัญหาเท่านั้น ซึ่งอาจจะทำให้ได้ผลการทดสอบที่ไม่ครอบคลุมมิติปัญหาอื่น ๆ ที่ยังไม่ได้ทำการทดสอบ ซึ่งควรทำการทดสอบเพิ่มเติม

ข้อเสนอแนะ

1. ควรมีการศึกษาทดลองสร้างแผนการทดลองมิติอื่น ๆ รวมทั้งสร้างตัวแบบพยากรณ์เพิ่มเติม เพื่อให้มีความชัดเจนของผลการพยากรณ์ยิ่งขึ้น

2. ควรใช้ตัวแบบทางสถิติอื่น ๆ เพิ่มเติม เช่น ตัวแบบ MARS หรือวิธีการอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้องกับ Machine Learning เป็นต้น

บรรณานุกรม

1. Box, G.E.P, Hunter, W.G., Hunter, J.S., 2005. ***Statistics for Experimenters: Design, Innovation, and Discovery.*** 2nd Edition, John Wiley & Sons, New York.
2. Butler, N.A., 2001. ***Optimal and orthogonal latin hypercube designs for computer experiments.*** Biometrika, 88(3): 847-857.
3. Cioppa, T.M., Lucas, T.W. 2007. ***Efficient Nearly Orthogonal and Space-Filling Latin Hypercubes.*** Technometrics, 49(1): 45-55
4. Crary, S.B. 2002. ***Design of Computer Experiments for Metamodel Generation***. Analog Integrated Circuits and Signal Processing, 32, 7-16, 2002.
5. Cressie, N. A. C. 1991. Statistics for Spatial Data. John Wiley, New York.
6. Etman, L.E.P 1994. ***Design and analysis of computer experiments: The method of Sacks et al.***, Engineering Mechanics report WFW 94.098, Eindhoven University of Technology.
7. Fang, K. T., Li, R., Sudjianto, A. 2005. ***Design and modeling for computer experiments.*** Chapman & Hall/CRC, London UK.
8. Grosso, A., Jumali, A.R.M.J.U., Locatelli, M. 2009. ***Finding maximin latin hypercube designs by Iterated Local Search heuristics***. European Journal of Operational Research, 197: 541-547.
9. Hock, W., Schittkowski, K., 1981. ***Test examples for nonlinear programming codes***. Berlin, Heidelberg, New York: Springer.
10. Husslage, B.G.M., Rennen, G., van Dam, E. R., and Hertog, D.D., 2011. ***Space-filling Latin hypercube designs for computer experiments.*** Optim Eng, 12, 611-630.
11. Jin, R., Chen, W., and Sudjianto, A. (2005). ***An efficient algorithm for constructing optimal design of computer experiments***. Journal of Statistical Planning and Inference, 134: 268-287.
12. Johnson, M. E., Moore, I.M., and Ylvisaker, D. (1990). ***Minimax and maximin distance designs.*** Journal of Statistical Planning and Inference, 26:131-148.
13. Joseph, V.R., Hung, Y., 2008. ***Orthogonal-Maximin Latin Hypercube Designs***. Statistica Sinica, 18: 171-186.
14. Jourdan A. et Franco J. (2010). ***Optimal Latin hypercube designs for the Kullback-Leibler criterion.*** AStA Advances in Statistical Analysis, 94 (4), 341-351
15. Koehler, J., Owen, A.B., 1996. ***Computer experiments. Handbook of Statistics***, Elsevier Science, New York, pp. 261-308.
16. Leary, S., Bhaskar, A., and Keane, A. 2003. ***Optimal orthogonal-array-based latin hypercubes***. Journal of Applied Statistics, 30(5): 585-598.
17. Li, W. and Wu, C.F.J. (1997). ***Columnwise-pairwise algorithms with applications to the construction of supersaturated designs***. Technometrics, 39:171-179.
18. Liefvandahl, M. and Stocki, R. (2006). ***Study on algorithms for optimization of latin hypercubes***. Journal of Statistical Planning and Inference, 136:3231-3247.

19. Mckay, M., Beckman, R., Conover, W., 1979. ***A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code.*** Technometrics 21, 239-246.
20. Montgomery, D.C., 2009. ***Design and analysis of Experiments.*** John Wiley & Sons, New York.
21. Morris, M.D., Mitchell, T.J., 1995. ***Exploratory design for computer experiments.*** Journal of Statistical planning and inference, 43: 381-402.
22. Na-Udom, A., 2007. ***Experimental design methodology for modeling response from computer simulated experiments***. Ph.D. thesis, Curtin University of Technology.
23. Prescott, P., 2009. ***Orthogonal-column Latin hypercube design with small samples***. Computational Statistics and Data Analysis, 53: 1191-1200.
24. Rungrattanaubol, J., Na-udom, A., 2007. ***Comparison of evolutionary search algorithms in computer simulated experiments***. The 11th National Computer Science and Engineering Conference (NCSEC 2007), 19-21 November 2007, Miracle Grand Hotel, Bangkok, Thailand.
25. Sacks, J., Welch, W.J., Mitchell, T.J. and Wynn, H.P., 1989. ***Design and Analysis of Computer Experiments.*** Statistical Science 4(4), 409-435.
26. Santiago, J., Claeys-Bruno, M. and Sergent, M. 2012. ***Construction of space-filling designs using WSP algorithm for high dimensional spaces***. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 113: 26-31.
27. Shewry, M. and Wynn, H. P., 1987. ***Maximin entropy design. Journal of applied statistics,*** 14(2):165-170.
28. Simpson, T.W., Lin, D. K. J. and Chen, W. 2001. ***Sampling strategies for computer experiments: Design and analysis.*** International Journal of Reliability and Applications, 2(3): 209-240.
29. Steinberg, D.M., 2006. ***A construction method for orthogonal Latin hypercube designs.*** Biometrika, 93(2): 279-288.
30. Welch, W.J., Buck, R.J., Sacks, J., Wynn, H.P., Mitchell, T.J., and Morris, M.D., 1992. ***Screening, predicting, and computer experiments***. Technometrics 34, 15-25.
31. Ye, K. Q., 1998. ***Orthogonal column latin hypercubes and their application in computer experiments***. Journal of the American Statistical Association 93, 1430-1439.
32. Ye, K.Q., Li, W., Sudjianto, A., 2000. ***Algorithmic construction of optimal symmetric Latin hypercube designs.*** Journal of Statistical planning and inference 90, 145-159.
33. Viana, F. A. C., Venter, G., Balabanov, V., 2010. ***An algorithm for fast optimal latin hypercube design of experiments.*** International Journal for Numerical Methods in Engineering 82(2), 135-156.

ภาคผนวก

บทความวิจัยที่ได้รับการตีพิมพ์ลงในรายงานสืบเนื่องจากการประชุมวิชาการระดับนานาชาติ
International Conference on Applied Statistics