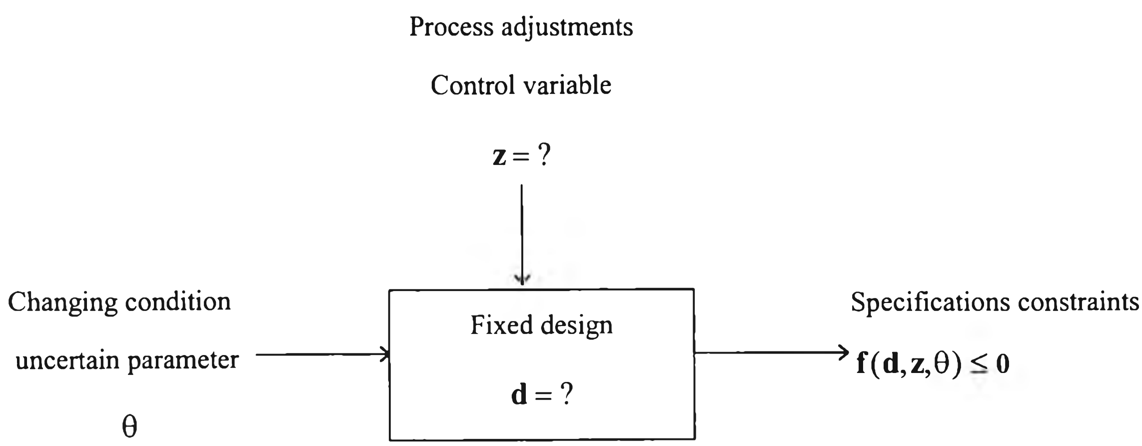
บทที่ 3
วิธีการออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอน

การออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอน คือการออกแบบ และหาสภาวะปฏิบัติการที่จะทำให้ระบบปฏิบัติการอยู่ในสภาวะคงตัว (steady state) และสอดคล้องกับข้อจำกัดของกระบวนการได้ในขณะที่ปฏิบัติการจริง ที่มีการเปลี่ยนแปลงอยู่ในกระบวนการ หรืออาจกล่าวได้ว่า ในขั้นตอนที่มินิไมซ์ (minimize) ค่าใช้จ่ายเพื่อหาค่าจุดออกแบบที่เหมาะสม ผู้ออกแบบจะต้องมั่นใจว่ากระบวนการที่ออกแบบนั้นจะสามารถปฏิบัติการในสภาวะปฏิบัติจริงได้ อยู่ในสภาวะคงตัวได้ และสอดคล้องกับข้อจำกัดของกระบวนการได้ตลอดทุกค่าของตัวแปรที่เปลี่ยนแปลงในขณะปฏิบัติการ อธิบายได้ดังรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 อธิบายความหมายการออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอน (Grossmann และ Floudas, 1987)

3.1 ชนิดของความไม่แน่นอน

ความไม่แน่นอนคือตัวแปรที่มีการเปลี่ยนแปลงรอบ ๆ ค่าหนึ่งอยู่ตลอดเวลาไม่อยู่นิ่ง หรือตัวแปรที่ไม่ทราบค่าที่ชัดเจนทราบเพียงช่วงที่จะเป็นไปได้ ซึ่งในสภาวะปฏิบัติการจริงจะมีความไม่แน่นอนเกิดขึ้น ความไม่แน่นอนสามารถแบ่งตามธรรมชาติแหล่งกำเนิดของความไม่แน่นอนในกระบวนการได้เป็น 4 ชนิด ดังนี้ (Ierapetritou, Acevedo และ Pistikopoulos; 1996)

1. ความไม่แน่นอนของแบบจำลอง (Model-inherent uncertainty) ได้แก่ ค่าคงที่ทางจลนพลศาสตร์ (kinetic constants), คุณสมบัติทางกายภาพของสาร (physical properties) และค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน เป็นต้น ซึ่งค่าเหล่านี้เกิดจากการทดลองโรงงานต้นแบบ (pilot-plant) จึงเป็นค่าที่มีความไม่แน่นอนอยู่ในตัว โดยทั่วไปความไม่แน่นอนชนิดนี้จะอยู่ในรูปช่วงที่คาดว่าจะเกิดได้จริง (range of possible realization) หรืออยู่ในรูปฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น

2. ความไม่แน่นอนของกระบวนการ (Process-inherent uncertainty) ได้แก่ ความแปรปรวนของอัตราการไหล และอุณหภูมิ ซึ่งความไม่แน่นอนชนิดนี้ได้จากเครื่องมือวัด (measurements) ดังนั้นความไม่แน่นอนชนิดนี้จะอยู่ในรูปของฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น

3. ความไม่แน่นอนภายนอก (External uncertainty) ได้แก่ ความต้องการผลิตภัณฑ์, ราคา, ค่าเงิน และสภาวะแวดล้อมอื่น ๆ ซึ่งความไม่แน่นอนชนิดนี้ได้จากเทคนิคการทำนาย (forecasting techniques) จากข้อมูลในอดีต, ใบสั่งซื้อจากลูกค้า และความต้องการของตลาด เป็นตัวช่วยทำนายค่าความไม่แน่นอนชนิดนี้ ดังนั้นค่าที่ได้จากการทำนายนี้จึงมีความไม่แน่นอนอยู่ในตัว โดยที่ความไม่แน่นอนชนิดจะมีลักษณะทั้งแบบรูปช่วงที่คาดว่าจะเกิดได้จริง หรือรูปฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น

4. ความไม่แน่นอนดิสครีต (Discrete uncertainty) เป็นความไม่แน่นอนที่เกิดจากความสามารถใช้งานได้ของเครื่องมือทดลอง หรือเหตุการณ์ดิสครีตแบบสุ่มอื่น (random discrete events) เช่น บางช่วงอุณหภูมิหรือความดันของเครื่องมือที่ไม่สามารถใช้งานได้ โดยความไม่แน่นอนแบบนี้จะอยู่ในรูปแจกแจงความน่าจะเป็นแบบดิสครีต

จากชนิดของความไม่แน่นอนที่เกิดขึ้นทั้งในขั้นตอนออกแบบ และปฏิบัติการ สามารถแบ่งการออปติไมซ์เป็น 2 แบบ คือ แบบดีเทอร์มินิสติก ซึ่งเป็นการออปติไมซ์ที่ให้ความไม่แน่นอนแบบดิสครีท สำหรับความไม่แน่นอนชนิดที่อยู่ในรูปช่วงที่น่าจะเป็นได้จริง และแบบสโตแคสติก ซึ่งเป็นการออปติไมซ์ที่ให้ความไม่แน่นอนเป็นแบบต่อเนื่อง สำหรับความไม่แน่นอนชนิดที่อยู่ในรูปของฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น

3.2 การออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอน (Two Stage Programming)

รูปแบบคณิตศาสตร์ของปัญหาการออกแบบภายใต้ความไม่แน่นอน สามารถแสดงดังสมการ (3.1) โดยจะเลือก เวคเตอร์ตัวแปรออกแบบ, ตัวแปรควบคุม และ ตัวแปรสเตท $\mathbf{d}, \mathbf{z}, \mathbf{x}$ ตามลำดับ ที่ทำให้ฟังก์ชันค่าใช้จ่ายมีค่าต่ำที่สุด และสอดคล้องกับข้อจำกัดของกระบวนการ เมื่อมีความไม่แน่นอนอยู่ในกระบวนการ (Biegler, Grossmann และ Westerberg, 1997: 690-718)

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x}} C(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta)$$

โดยมีเงื่อนไข $\mathbf{h}(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta) = \mathbf{0}$

$$\mathbf{g}(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta) \leq \mathbf{0} \tag{3.1}$$

$$\mathbf{x} \in \mathbf{X}, \quad \mathbf{z} \in \mathbf{Z}, \quad \mathbf{d} \in \mathbf{D}$$

เมื่อ $\mathbf{d}$ แทน เวคเตอร์ตัวแปรออกแบบ เช่น ขนาดของอุปกรณ์ จำนวนเทรย์

$\mathbf{z}$ แทน เวคเตอร์ตัวแปรควบคุม เช่น อัตราการไหล, อุณหภูมิ

$\mathbf{x}$ แทน เวคเตอร์ตัวแปรเสตท เช่น อุณหภูมิ, ความเข้มข้น

θ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรความไม่แน่นอนเป็นรูปฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น หรือในรูปของช่วงที่น่าจะเป็นไปได้จริง เช่น สภาวะขาเข้า, ค่าคงที่ของปฏิกิริยา

$C(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta)$ แทน สมการออปเจกทีฟฟังก์ชันทางเศรษฐศาสตร์ เช่น ฟังก์ชันค่าใช้จ่าย

$\mathbf{h}(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta)$ แทน สมการข้อจำกัด เช่น สมการสมดุลมวลสาร, สมการสมดุลพลังงาน หรือ สมการผลรวมของเศษส่วนโมล เป็นต้น

$\mathbf{g}(\mathbf{h},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta)$ แทน อสมการข้อจำกัดของการออกแบบ และข้อจำกัดต่าง ๆ เช่น ข้อจำกัดทางกายภาพของสาร หรือข้อจำกัดที่เจาะจง (specifications) ของผลิตภัณฑ์ เป็นต้น

จากสมการ (3.1) สามารถขจัดตัวแปรสเตท (eliminate the state variable) ได้

$$\mathbf{h}(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x},\theta) = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \tag{3.2}$$

แทนสมการ (3.2) ลงในอสมการข้อจำกัดของสมการ (3.2)

$$\mathbf{g}(\mathbf{d},\mathbf{z},\mathbf{x}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta)) = \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \leq \mathbf{0} \tag{3.3}$$

ดังนั้นสมการ (3.1) จะอยู่ในรูปอย่างง่าย ดังนี้

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}} C(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta)$$

โดยมีเงื่อนไข $\mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \leq \mathbf{0}$ (3.4)

$$\mathbf{z} \in \mathbf{Z}, \mathbf{d} \in \mathbf{D}$$

เมื่อ $\mathbf{f}$ แทน เวคเตอร์อสมการข้อจำกัดของผลลัพธ์ที่ขจัดตัวแปรสเตท

จากรูปแบบคณิตศาสตร์ของปัญหาออปติไมซ์ดังสมการ (3.4) จะเห็นได้ว่า ขณะที่ความไม่แน่นอน θ เปลี่ยนไปจะส่งให้ผลต่อค่าออปเจกทีฟฟังก์ชัน C มีค่าเปลี่ยนไป และอสมการข้อจำกัดของกระบวนการ $\mathbf{f}$ มีการเปลี่ยนไปด้วย ดังนั้นการคำนวณสมการ (3.4) โดยตรงนั้นเป็นไปได้ยากมาก เพราะตัวแปรความไม่แน่นอน θ ในสมการ (3.4) ซึ่งเป็นการกระจายแบบฟังก์ชันความน่าจะเป็นทำให้ค่าของความไม่แน่นอน θ มีมากมายหลายค่าไม่จำกัดจำนวน จะทำให้เป็นปัญหาการออปติไมซ์ที่ใหญ่มาก

อีกทั้งการแก้ปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนตามสมการที่ (3.4) สำหรับกระบวนการเคมีต้องแบ่งชนิดตัวแปรตัดสินใจเป็นตัวแปรออกแบบ **d** และตัวแปรควบคุม **z** เนื่องจากตัวแปรออกแบบ **d** จะเป็นค่าคงที่ในขณะปฏิบัติการจริง ส่วนตัวแปรควบคุม **z** จะเป็นตัวแปรที่สามารถปรับได้ตามค่าความไม่แน่นอนที่เปลี่ยนไปในขณะปฏิบัติการจริง Halemane และ Grossmann (1983) จึงได้เสนอว่าปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอน เป็นการคำนวณแบบ 2 ขั้นตอน (Two-stage programming)

ขั้นแรกจะเป็นขั้นออกแบบ (Design stage) ต้องหาค่าออกแบบ **d** เช่น ขนาดของเครื่องปฏิกรณ์ จำนวนเทรย์ เป็นค่าคงที่ ซึ่งทำให้ค่าใช้จ่ายคาดหวังหรือค่าเฉลี่ย (expected) มีค่าต่ำสุดตลอดช่วงของความไม่แน่นอนหรือตลอดทุกค่าของความไม่แน่นอน θ ที่เกิดในขณะปฏิบัติการ อธิบายได้ดังสมการ (3.5)

$$\min_{\mathbf{d}} \underset{\theta}{E}\left\{\overline{C}(\mathbf{d},\theta)\right\} \tag{3.5}$$

เมื่อ $\overline{C}(\mathbf{d},\theta)$ แทน ค่าใช้จ่ายต่ำสุดสำหรับแต่ละค่าของความไม่แน่นอนซึ่งเป็นคำตอบที่ได้จากในขั้นที่สอง

ส่วนขั้นสองหรือขั้นปฏิบัติการ (Operating stage) จะให้ตัวแปรออกแบบ **d** คงที่ แล้วหาค่าตัวแปรควบคุม **z** ซึ่งเป็นค่าที่สามารถปรับได้ตามค่าของความไม่แน่นอนที่เปลี่ยนไป ในขณะปฏิบัติการ ที่ทำให้ค่าใช้จ่ายต่ำที่สุด $\overline{C}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta)$ โดยมีเงื่อนไขค่าตัวแปรออกแบบที่เลือกนี้จะทำให้ข้อจำกัดทุกค่าของความไม่แน่นอนน้อยกว่าหรือเท่ากับศูนย์เสมอ

$$\min_{\mathbf{z}} C(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta)$$

โดยมีเงื่อนไข $$\mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \le \mathbf{0} \tag{3.6}$$

เมื่อนำสมการ (3.5) มาเขียนรวมกับสมการ (3.6) จะได้เป็น

$$\min_{\mathbf{d}} \underset{\theta}{E}\left[\min_{\mathbf{z}} C(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \le \mathbf{0}\right] \tag{3.7}$$

จะเห็นได้ว่าค่าความไม่แน่นอนในสมการ (3.7) นั้นจะมีมายมากหลายค่าจำนวนไม่จำกัด ทำให้การแก้ปัญหาสมการ (3.7) เป็นปัญหาออปติไมซ์ที่ยุ่งยากมาก นอกจากนี้การแก้ปัญหาออปติไมซ์ 2 ขั้นตอนในสมการ (3.7) ไม่สามารถทำได้โดยตรง เพราะจากนิยามของค่าคาดหวังหรือค่าเฉลี่ย (Expectation or Mean) แทนในสมการ (3.7) จะได้

$$\underset{\theta}{E}(\overline{C}(\mathbf{d},\theta)) = \int_{\theta \in R} \overline{C}(\mathbf{d},\theta) J(\theta) d\theta \tag{3.8}$$

เมื่อ $\overline{C}(\mathbf{d},\theta) = \min_{\mathbf{z}}\left\{C(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta) \le \mathbf{0}\right\}$ และ $J(\theta)$ แทนฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็น (Distribution probability function) ของความไม่แน่นอน θ

จากสมการ (3.8) จะเห็นได้ว่าค่า $\overline{C}(\mathbf{d},\theta)$ เป็นฟังก์ชันค่าใช้จ่ายต่ำที่สุดที่ได้จากการปรับตัวแปรควบคุม $\mathbf{z}$ ที่ทำให้ฟังก์ชันค่าใช้จ่ายมีค่าต่ำที่สุด นั้นคือการหาค่าหวังจะต้องเป็นการทำอินทิเกรตบนปัญหาออปติไมซ์ในขั้นที่ 2 หรือขั้นปฏิบัติการ เท่ากับว่าการอินทิเกรตได้นั้นจะต้องรู้คำตอบ $\overline{C}(\mathbf{d},\theta)$ ในขั้นที่สองก่อน จึงทำให้เป็นปัญหาออปติไมซ์ที่ยุ่งยากมากขึ้น

ดังนั้นจึงได้การพัฒนาแนวทางหาคำตอบของปัญหาออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอนได้เป็น 2 แนวทาง คือ แบบดีเทอร์มินิสติก และแบบสโตแคสติก ตามลักษณะของความไม่แน่นอนที่ใส่ลงในสมการออปติไมซ์

3.2.1 การหาค่าแบบดีเทอร์มินิสติก (Deterministic Approach)

การค่าหาแบบดีเทอร์มินิสติกจะให้ความไม่แน่นอนเป็นแบบมีขอบเขต มีค่าเฉพาะเจาะจง โดยใช้วิธีสร้างภาพของ Grossmann และ Sargent (1978) ที่ได้รับการยอมรับ มีการนำไปประยุกต์ใช้กับกระบวนการต่าง ๆ มากมายได้ หลักการของวิธี Grossmann และ Sargent (1978) คือจะใช้สูตรการอินทิเกรตของเกาส์เซียนและเรดู (Gaussian and Radau integration formulation) แปลงสมการ (3.8) ที่เป็นการออปติไมซ์ไม่จำกัด (infinite optimization) ให้เป็นการรวมกับแฟกเตอร์น้ำหนักที่มีจำนวนจำกัด (finite weighted sum)

$$E(\overline{C}(\mathbf{d},\theta)) = \sum_{p=1}^{P} \sigma^{p} \overline{C}\left(\mathbf{d},\theta^{p}\right),\ p = 1,2,3,\ldots,P \tag{3.9}$$

เมื่อ σ^p ให้เป็นแฟกเตอร์น้ำหนักของความไม่แน่นอน θ^p ที่มีจำนวน P เทอม ซึ่ง $\sum_{p=1}^{P}\sigma^p = 1$ โดยที่แฟกเตอร์น้ำหนัก σ^p เปรียบเหมือนกับค่าความน่าจะเป็น (probability) ของโอกาสที่จะเกิดของแต่ละเหตุการณ์ของความไม่แน่นอน θ^p

เมื่อนำสมการ (3.9) แทนลงในสมการ (3.7) โดยให้ความไม่แน่นอนมีการกระจายแบบดิสครีต θ^p จำนวน P จุด และกำหนดน้ำหนักของแต่ละเทอมของความไม่แน่นอน ใส่ลงในสมการออปเจกทีฟฟังก์ชันเพื่อหาค่าคาดหวังของค่าใช้จ่ายจะได้เป็น

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^p} \quad \sum_{p=1}^{P} \sigma^{p}\ C(\mathbf{d},\mathbf{z}^{p},\theta^{p})$$

$$\text{โดยมีเงื่อนไข} \qquad \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z}^{p},\theta^{p}) \le \mathbf{0} \quad ;\ p = 1,2,\ldots,P \tag{3.10}$$

เมื่อ $\mathbf{z}^p$ แทน เวคเตอร์ตัวแปรควบคุม แต่ละจุดของค่าความไม่แน่นอน θ^p, $p = 1,2,\ldots,P$

σ^p แทน แฟกเตอร์น้ำหนักของความไม่แน่นอน θ^p ซึ่ง $\sum_{p=1}^{P}\sigma^p = 1$ และความไม่แน่นอนแต่สถานการณ์ θ^p จะเป็นความไม่แน่นอนในช่วง $\mathbf{T} = \{\theta|\theta^L \leq \theta^p \leq \theta^U\}$ เมื่อ θ^L แทน ค่าขอบล่างของความไม่แน่นอน และ θ^U แทนค่าขอบบนของความไม่แน่นอน ซึ่งทั้ง θ^L และ θ^U เป็นค่าที่วิศวกรผู้ออกแบบเป็นคนกำหนด

ดังนั้นการค่าแบบดีเทอร์มินิสติกสามารถเขียนเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

ขั้นตอนที่ 1. กำหนดขอบเขตของความไม่แน่นอน $\theta^L \leq \theta \leq \theta^U$

ขั้นตอนที่ 2. ใช้วิธีสร้างภาพ (scenario) หาสถานการณ์ที่ดีที่สุด (Best), สถานการณ์ปกติ (Normal) และสถานการณ์แย่ที่สุด (Worst) ของความไม่แน่นอน: θ^p

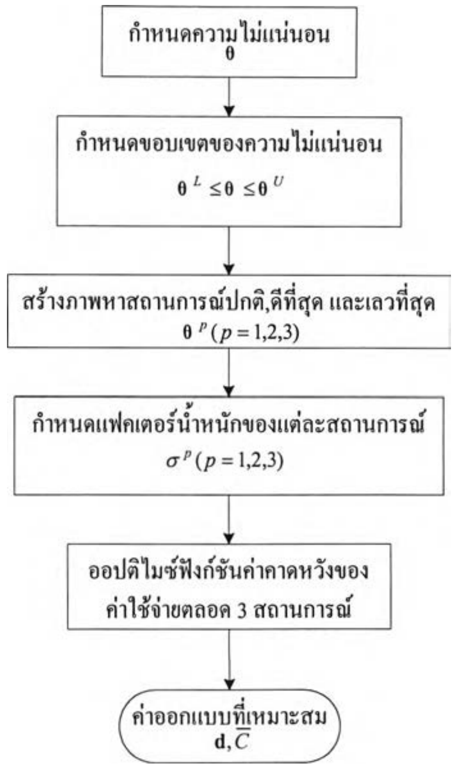
ขั้นตอนที่ 3. กำหนดแฟตเตอร์น้ำหนัก σ^p หรือโอกาสที่จะเกิดของแต่ละสถานการณ์สำหรับแต่ละตัวของความไม่แน่นอน θ^p

ขั้นตอนที่ 4. หาค่าตัวแปรออกแบบ $\mathbf{d}$ และตัวแปรควบคุมแต่ละสถานการณ์ (scenario) $\mathbf{z}^1, \mathbf{z}^2, \mathbf{z}^3, \ldots, \mathbf{z}^P$ จากออปติไมซ์สมการ (3.11)

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^p} \quad \sum_{p=1}^{P}\sigma^p \, C(\mathbf{d},\mathbf{z}^p,\theta^p)$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z}^p,\theta^p) \leq \mathbf{0} \tag{3.11}$$
$$\sum_{p=1}^{P}\sigma^p = 1\,; \qquad p = 1,2,\ldots,P$$

สรุปแล้ววิธีนี้จะกำหนดให้ความไม่แน่นอนมีขอบเขตและจำนวนจำกัด P ค่า แล้วกำหนดแฟกเตอร์น้ำหนัก สำหรับความไม่แน่นอนแต่ละตัว เพื่อหาค่าตัวแปรออกแบบ และตัวแปรควบคุมที่เหมาะสม ซึ่งทำให้กระบวนการปฏิบัติการในสภาวะคงตัว และอยู่ในขอบเขตดำเนินการ ขณะมีความไม่แน่นอนในกระบวนการตลอดทุกค่าของความไม่แน่นอน θ สำหรับไดอะแกรมการหาค่าแบบดีเทอร์มินิสติกจะแสดงได้ดังรูปที่ 3.2 ดังนี้



รูปที่ 3.2 ไดอะแกรมวิธีแก้ปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนแบบดีเทอร์มินิสติก

3.2.2 การหาค่าแบบสโตแคสติก (Stochastic Approach)

การหาค่าแบบสโตแคสติกจะกำหนดให้ความไม่แน่นอนเป็นตัวแปรสุ่มที่มีการกระจายแบบฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็นอย่างต่อเนื่อง เช่น อุณหภูมิขาเข้า ความต้องการของผลิตภัณฑ์

เริ่มจากสมการปัญหาออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอน ตามสมการ (3.8) Straub และ Grossmann (1990) ได้ใช้สูตรเกาส์เซียนควอดราเจอร์ (Gaussian quadrature) ช่วยในการอินทิเกรตฟังก์ชันค่าใช้จ่ายคาดหวังได้ดังนี้

$$\int_{\theta\in\mathbf{R}} \overline{C}(\mathbf{d},\theta)J(\theta)d\theta = \sum_{i}^{Q} w^i \overline{C}(\mathbf{d},\theta^i)J(\theta^i)\,,\ \ \theta^i \in \mathbf{R} \tag{3.12}$$

เมื่อ w^i แทน แฟกเตอร์น้ำหนักของจุดควอดราเจอร์ (quadrature point) ที่ i ซึ่งค่า w^i มีค่าตามที่สูตรเกาส์เซียนควอดราเจอร์กำหนด (Carnahan, Luther และ Wilke, 1969) และ i คือ ตำแหน่งจุดควอดราเจอร์ (quadrature points) ของความไม่แน่นอน, $i = 1,2,\ldots,Q$

นำสมการ (3.12) ลงในปัญหาออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอนดังสมการ (3.8) จะได้

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^1,\mathbf{z}^2,\ldots,\mathbf{z}^Q} \sum_{i=1}^{Q} w^i C(\mathbf{d},\mathbf{z}^i,\theta^i) J(\theta) \tag{3.13}$$

โดยมีเงื่อนไข $\mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z}^i,\theta^i) \leq \mathbf{0}$, $i = 1,2,\ldots,Q$ และ $\theta^i \in \mathbf{R}$

แต่การออปติไมซ์สมการ (3.13) โดยตรงนั้นยากมาก เพราะไม่สามารถหาขอบเขตปฏิบัติการของความไม่แน่นอน θ ได้ นั้นคือไม่ทราบช่วงความไม่แน่นอนที่จะทำให้กระบวนการสามารถปฏิบัติการอยู่ในสภาวะคงที่ และสอดคล้องกับข้อจำกัดของกระบวนการได้

ดังนั้นในขั้นแรกจะต้องหาขอบเขตของความไม่แน่นอนที่ทำให้ระบบมีความยืดหยุ่นที่สุด คือ หาช่วงของความไม่แน่นอนที่มากที่สุดซึ่งอยู่ในขอบเขตปฏิบัติการ โดยในงานวิจัยนี้จะแสดงคณิตศาสตร์การหาค่าแบบสโตแคสติก สำหรับกรณีที่มีความไม่แน่นอน 2 ตัวแปร ซึ่งในขั้นแรกจะเป็นการหาขอบเขตปฏิบัติการของความไม่แน่นอน โดยจะให้ค่าตัวแปรออกแบบมีค่าคงที่ แล้วหาขนาดของความไม่แน่นอนที่มีค่าน้อยที่สุดที่สอดคล้องกับข้อจำกัดของระบบ: θ_1^L และหาขนาดของความไม่แน่นอนที่มีค่ามากที่สุดที่สอดคล้องกับข้อจำกัดของระบบ : θ_1^U

$$\theta_1^U = \arg\left\{\max_{\theta_1,\theta_2,\mathbf{z}} \theta_1 \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta_1,\theta_2) \leq \mathbf{0}\right\} \tag{3.14}$$

$$\theta_1^L = \arg\left\{\min_{\theta_1,\theta_2,\mathbf{z}} \theta_1 \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta_1,\theta_2) \leq \mathbf{0}\right\} \tag{3.15}$$

จากแนวความคิดในสมการ (3.14) และ (3.15) สามารถหาค่าของ θ_1^L และ θ_1^U ได้ต้องออปติไมซ์ 2 ขั้น ต่อมา Ierapetritou และ Pistikopoulos (1994) ได้เสนอวิธีวิธีง่ายกว่า โดยการออปติไมซ์เพียงขั้นเดียวจากการหาผลต่างที่มากที่สุดระหว่าง θ_1^L และ θ_1^U ที่สอดคล้องกับข้อจำกัดของกระบวนการ

$$\max_{\theta_1^U,\theta_1^L}\left\{\theta^U_1 - \theta_1^L\right\}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}_1^U[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_1^U,\theta_2(.)] \leq \mathbf{0} \tag{3.16}$$
$$\mathbf{f}_1^L[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_1^L,\theta_2(.)] \leq \mathbf{0}$$

เมื่อ $\mathbf{f}_1^U$ แทน เวคเตอร์ของฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ θ_1^U

$\mathbf{f}_1^L$ แทน เวคเตอร์ของฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ θ_1^L

$\mathbf{z}(.)$ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรควบคุมที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด จะมีค่าอิสระในแต่ละข้อจำกัด

$\theta_2(.)$ แทน เวคเตอร์ของความไม่แน่นอนตัวที่ 2 ที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด จะมีค่าอิสระในแต่ละข้อจำกัด

จากคำตอบที่ได้จากสมการ (3.16) จะได้ขอบที่ล่าง (lower bound) และขอบบน (upper bound) ของความไม่แน่นอน θ_1 ซึ่งจะนำมาหาจุดควอดราเจอร์ (quadrature point) ในปริภูมิ (space) ของ θ_1 ดังสมการ (3.17) ซึ่งเป็นสูตรของเกาส์เซียนควอดราเจอร์

$$\theta_1^{q_1} = 0.5\left[\theta_1^U\left(1+\nu_1^{q_1}\right)+\theta_1^L\left(1-\nu_1^{q_1}\right)\right], \qquad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1 \tag{3.17}$$

เมื่อ Q_1 คือ จำนวนของจุดควอดราเจอร์สำหรับ θ_1

$\nu_1^{q_1}$ คือ พารามิเตอร์ที่สัมพันธ์กับตำแหน่งของจุดควอดราเจอร์ ในช่วง $[-1,1]$ (Carnahan et. al., 1969)

สำหรับกรณีที่มีความไม่แน่นอน 2 ตัว สามารถหาขอบเขตความไม่แน่นอนตัวที่ 2 ได้ตามแนวคิดข้างต้น โดยแทนความไม่แน่นอนตัวที่ 1 ด้วยค่า $\theta_1^{q_1}$ ที่ได้จากสมการ (3.17) แล้วหาค่าขอบเขต $\theta_2^{q_1}$ ได้จาก

$$\theta_2^U = \arg\left\{\max_{\theta_2,\mathbf{z}} \theta_2 \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta_1^{q_1},\theta_2) \le \mathbf{0}\right\} \tag{3.18}$$

$$\theta_2^L = \arg\left\{\min_{\theta_2,\mathbf{z}} \theta_2 \middle| \mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z},\theta_1^{q_2},\theta_2) \le \mathbf{0}\right\} \tag{3.19}$$

ค่าขอบล่างและขอบบนของความไม่แน่นอนของ θ_2 สำหรับแต่ละจุดควอดราเจอร์ $\theta_1^{q_1}$ สามารถหาได้ โดยวิธีที่ง่ายกว่าคือหาผลต่างที่มากที่สุดของ $\theta_2^{U_{q_1}}$ และ $\theta_2^{L_{q_1}}$ ดังนี้ (Ierapetritou และ Pistikopoulos, 1994)

$$\max_{\theta_2^{U_{q_1}},\theta_2^{L_{q_1}}} \left\{\theta_2^{U_{q_1}} - \theta_2^{L_{q_1}}\right\}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}_2^{U_{q_1}}[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_1^{q_1},\theta_2^{U_{q_1}}] \le \mathbf{0} \tag{3.20}$$
$$\mathbf{f}_2^{L_{q_1}}[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_1^{q_1},\theta_2^{L_{q_1}}] \le \mathbf{0}$$

เมื่อ $\mathbf{f}_2^{U_{q_1}}$ แทน ฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_1^{q_1}$ และ $\theta_2^{U_{q_1}}$

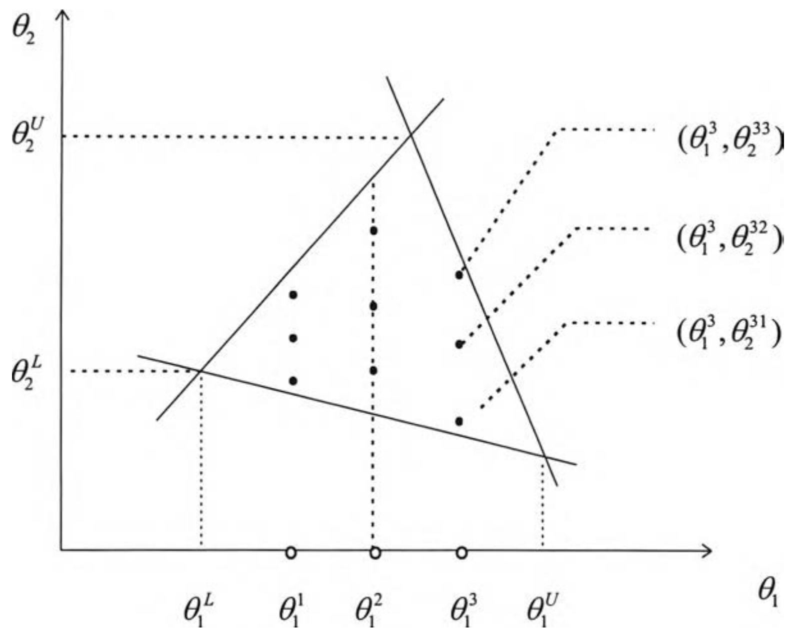
$\mathbf{f}_2^{L_{q_1}}$ แทน ฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_1^{q_1}$ และ $\theta_2^{L_{q_1}}$

$\mathbf{z}(.)$ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรควบคุมที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด ซึ่งจะมีค่าอิสระแต่ละข้อจำกัด

เมื่อนำคำตอบ $\theta_2^{U_{q_1}},\theta_2^{L_{q_1}}$ ที่ได้ในสมการ (3.20) มาหาจุดควอดราเจอร์ใน space ของ θ_2 จาก

$$\theta_2^{q_1q_2} = 0.5[\theta_2^{U_{q_1}}(1+\nu_2^{q_2})+\theta_2^{L_{q_1}}(1-\nu_2^{q_2})], \quad q_1 = 1,2,\ldots,Q, \quad q_2 = 1,2,\ldots,Q_2 \tag{3.21}$$

ถึงขั้นนี้จะได้จุดควอดราเจอร์ $\theta_1^{q_1}$ และ $\theta_2^{q_1q_2}$ ซึ่งเป็นค่าที่อยู่ในปริภูมิ θ_1 และ θ_2 และกระจายอยู่ในขอบเขตปฏิบัติการของความไม่แน่นอนทั้งสอง แสดงได้ดังรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 แสดงตำแหน่งของจุดควอดราเจอร์ในขอบเขตปฏิบัติการ

รูปที่ 3.3 แสดงตำแหน่งของจุดควอดราเจอร์ในขอบเขตปฏิบัติการสำหรับใช้วิธีอินทิกรัลกรณีที่กำหนดให้มี 3 ควอดราเจอร์ ซึ่งแผงผังจุดควอดราเจอร์นี้ (quadrature scheme) จะใช้แทนจุดทั้งหมดในขอบเขตปฏิบัติงานของความไม่แน่นอน ในการหาค่าที่ดีของการอินทิกรัลค่าคาดหวังของฟังก์ชันค่าใช้จ่าย

สรุปแล้วเมื่อรวมสมการแก้ปัญหาความยืดหยุ่นตามสมการ (3.16) และ (3.20) ซึ่งนับเป็นปัญหาย่อย (sub-problem) ในการแก้ปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอน ลงในปัญหาหลัก (main problem) ตามสมการที่ (3.13) จะได้ดังสมการข้างล่างนี้

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1 q_2}} \left\{ \frac{\theta_1^U - \theta_1^L}{2} \sum_{q_1=1}^{Q_1} w_1^{q_1} \frac{\theta_2^{U_{q1}} - \theta_2^{L_{q2}}}{2} \sum_{q_2=1}^{Q_2} w_2^{q_2} C(\mathbf{d}, \mathbf{z}^{q_1 q_2}, \theta_1^{q_1}, \theta_2^{q_1 q_2}) J(\theta_1^{q_1}, \theta_2^{q_1 q_2}) \right\}$$

โดยมีเงื่อนไข $\quad \mathbf{f}\left(\mathbf{d}, \mathbf{z}^{q_1 q_2}, \theta_1^{q_1}, \theta_2^{q_1 q_2}\right) \leq \mathbf{0}, \qquad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1,\ q_2 = 1,2,\ldots,Q_2$

เมื่อ

$$\theta_1^U, \theta_1^L = \arg \max_{\theta_1^U, \theta_1^L} \{\theta_1^U - \theta_1^L\}$$

โดยมีเงื่อนไข

$$\mathbf{f}_1^U\left[\mathbf{d}, \mathbf{z}(.), \theta_1^U, \theta_2(.)\right] \leq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{f}_1^L\left[\mathbf{d}, \mathbf{z}(.), \theta_1^L, \theta_2(.)\right] \leq \mathbf{0} \tag{3.22}$$

$$\theta_2^{U_{q1}}, \theta_2^{L_{q1}} = \arg \max_{\theta_2^{U_{q1}}, \theta_2^{L_{q1}}} \{\theta_2^{U_{q1}} - \theta_2^{L_{q1}}\}$$

โดยมีเงื่อนไข

$$\mathbf{f}_2^{U_{q1}}[\mathbf{d}, \mathbf{z}(.), \theta_1^{q_1}, \theta_2^{U_{q1}}] \leq \mathbf{0}$$

$$\mathbf{f}_2^{L_{q1}}[\mathbf{d}, \mathbf{z}(.), \theta_1^{q_1}, \theta_2^{L_{q1}}] \leq \mathbf{0}$$

$$\theta_1^{q_1} = 0.5\left[\theta_1^U\left(1+\nu_1^{q_1}\right)+\theta_1^L\left(1-\nu_1^{q_1}\right)\right], \qquad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1$$

$$\theta_2^{q_1q_2} = 0.5[\theta_2^{U_{q_1}}(1+\nu_2^{q_2})+\theta_2^{L_{q_1}}(1-\nu_2^{q_2})], \quad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1, \quad q_2 = 1,2,\ldots,Q_2$$

ซึ่งปัญหาออปติไมซ์สมการ (3.22) ในข้างต้นจะเห็นว่าเป็นการออปติไมซ์หลายขั้นตอน (multilevel optimization) เพราะการคำนวณหาขอบเขตปฏิบัติการตามลำพังจากคำตอบของสมการออปติไมซ์ (3.16) และ (3.20) ค่าเวคเตอร์ตัวแปรออกแบบ จะไม่คงที่สำหรับการแก้ปัญหาสมการความยืดหยุ่นทั้งสอง

ดังนั้นการค่าแบบสโตแคสติกสามารถเขียนเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

ขั้นตอนที่ 1. กำหนดค่าออกแบบเริ่มต้น $\mathbf{d}$, ค่าใช้จ่ายที่คาดหวังหรือออปเจกทีฟฟังก์ชันเริ่มต้น $\overline{C}^0 = -\infty$, การคำนวณซ้ำ (iteration) ขั้นที่ 1: $k=1$ และค่าความผิดพลาด (error) ของการคำนวณซ้ำ (iteration) ε

ขั้นตอนที่ 2. แก้สมการ (3.16) เพื่อหาขอบเขตดำเนินการของความไม่แน่นอนตัวที่ 1 (θ_1)

ขั้นตอนที่ 3. หาจุดควอดราเจอร์ สำหรับ θ_1 ดังสมการ (3.17)

ขั้นตอนที่ 4. แก้สมการ (3.20) เพื่อหาขอบเขตดำเนินการของความไม่แน่นอนตัวที่ 2 (θ_2)

ขั้นตอนที่ 5. หาจุดควอดราเจอร์สำหรับ θ_2 ดังสมการ (3.21) เสร็จขั้นนี้จะได้แผนผังการกระจายของความไม่แน่นอน θ_1 และ θ_2

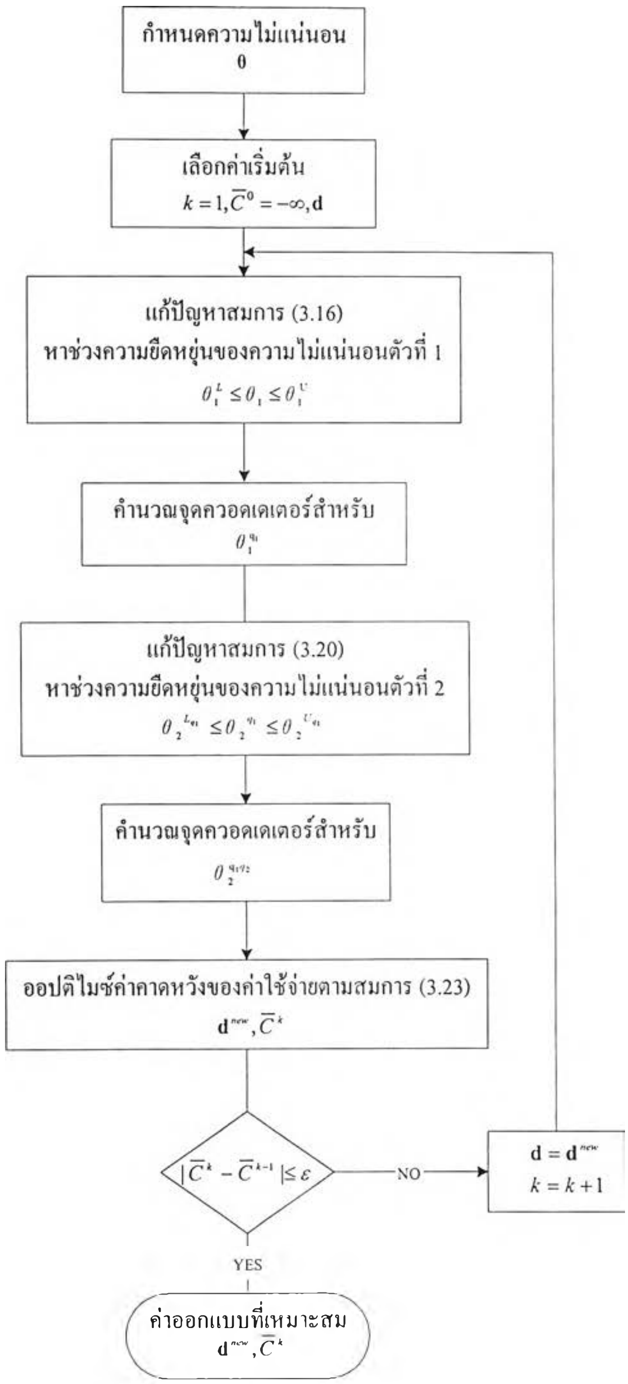
ขั้นตอนที่ 6. ออปติไมซ์หาค่าคาดหวังของค่าใช้จ่าย $\overline{C}^k$, $\mathbf{d}^{new}$

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1q_2}}\left\{\frac{\theta_1^U-\theta_1^L}{2}\sum_{q_1=1}^{Q_1} w_1^{q_1}\frac{\theta_2^{U_{q_1}}-\theta_2^{L_{q_2}}}{2}\sum_{q_2=1}^{Q_2} w_2^{q_2}C(\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1q_2},\theta_1^{q_1},\theta_2^{q_1q_2})J(\theta_1^{q_1},\theta_2^{q_1q_2})\right\}$$

โดยมีเงื่อนไข $\quad \mathbf{f}\left(\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1q_2},\theta_1^{q_1},\theta_2^{q_1q_2}\right)\le \mathbf{0}, \quad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1, \; q_2 = 1,2,\ldots,Q_2 \qquad (3.23)$

ขั้นตอนที่ 7. กลับไปคำนวณขั้นตอนที่ 2 อีกครั้ง โดยให้ $\mathbf{d}=\mathbf{d}^{new}$ และ $k=k+1$ จนกระทั่ง $\left|\overline{C}^k-\overline{C}^{k-1}\right|\le\varepsilon$ แล้วจึงหยุด จะได้ค่าคำตอบที่เหมาะสมออกมา

สำหรับการคำนวณของปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกแสดงในรูปไดอะแกรมได้ดังรูปที่ 3.4 ดังนี้



รูปที่ 3.4 ไดอะแกรมวิธีแก้ปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติก

3.2.3 การหาค่าแบบผสมดีเทอร์มินิสติกและสโตแคสติก

(Combined Deterministic/Stochastic Approach)

การหาค่าวิธีนี้เป็นการหาค่าแบบผสมทั้งแบบดีเทอร์มินิสติก และแบบสโตแคสติก โดยให้ความไม่แน่นอนแบบดีเทอร์มินิสติกเป็นตัวแปรแบบดิสครีตที่มีค่าจำเพาะเจาะจงจำนวนจำกัดแทนด้วยตัวแปร θ_d ส่วนความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกเป็นตัวแปรสุ่มที่มีการแจกแจงแบบฟังก์ชันความน่าจะเป็นแบบต่อเนื่อง แทนด้วยตัวแปร θ_s ในงานวิจัยนี้ได้ทำการวิจัยหาตัวแปรออกแบบ **d** โดยกำหนดให้พารามิเตอร์ มีลักษณะไม่แน่นอนแบบจำเพาะเจาะจงมีจำนวนจำกัด ส่วนตัวแปรมีลักษณะไม่แน่นอนแบบตัวแปรสุ่ม ดังนั้นการหาตัวแปรออกแบบ **d** ที่เหมาะสมจึงใช้วิธีผสมทั้งการหาค่าแบบสโตแคสติก และดีเทอร์มินิสติกตามที่ได้กล่าวแล้วในข้างต้นมารวมกัน ซึ่งสามารถเขียนเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

จากวิธีการหาค่าแบบสโตแคสติกยกตัวอย่างให้มีความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติก 2 ตัว คือ θ_{s_1} และ θ_{s_2} ดังนั้นการค่าแบบผสมดีเทอร์มินิสติกและสโตแคสติกสำหรับความไม่แน่นอนทั้ง 2 ตัวแปรสามารถเขียนเป็นขั้นตอนได้ดังนี้

ขั้นตอนที่ 1. กำหนดความไม่แน่นอน θ_s และ θ_d, ค่าออกแบบเริ่มต้น $\mathbf{d}$, ค่าใช้จ่ายที่คาดหวังหรือออปเจกทีฟฟังก์ชันเริ่มต้น $\overline{C} = -\infty$, $k = 1$ และค่าความผิดพลาด (error) ของการคำนวณซ้ำ (iteration): ε

ขั้นตอนที่ 2. หาขอบเขตดำเนินการของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 1 (θ_{s_1}) โดยใช้แก้สมการ (3.24) ซึ่งมีรูปแบบเดียวกับสมการ (3.16)

$$\max_{\theta_{s_1}^U,\theta_{s_1}^L}\left\{\theta_{s_1}^U-\theta_{s_1}^L\right\}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}_1^U[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{U_{q_1}},\theta_d] \le \mathbf{0} \qquad (3.24)$$
$$\mathbf{f}_1^L[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{L_{q_1}},\theta_d] \le \mathbf{0}$$

เมื่อ $\theta_{s_1}^U$ แทน ค่าขอบบนของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 1 ที่สอดคล้องกับข้อจำกัด

$\theta_{s_1}^L$ แทน ค่าขอบล่างของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 1 ที่สอดคล้องกับข้อจำกัด

$\mathbf{f}_1^U$ แทน เวคเตอร์ของฟังก์ชันข้อจำกัด **f** ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_{s_1}^U$

$\mathbf{f}_1^L$ แทน เวคเตอร์ของฟังก์ชันข้อจำกัด **f** ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_{s_1}^L$

$\mathbf{z}(.)$ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรควบคุมที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด จะมีค่าอิสระในแต่ละข้อจำกัด

$\theta_{s_2}(.)$ แทน ตัวแปรความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 2 ที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด จะมีค่าอิสระในแต่ละข้อจำกัด

θ_d แทน เวคเตอร์ตัวแปรความไม่แน่นอนแบบดีเทอร์มินิสติก

ขั้นตอนที่ 3. หาความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 1 ที่จุดควอดราเจอร์ q_1 : $\theta_{s_1}^{q_1}$

$$\theta_{s_1}^{q_1} = 0.5\left[\theta_{s_1}^{U}\left(1+\nu_1^{q_1}\right)+\theta_{s_1}^{L}\left(1-\nu_1^{q_1}\right)\right], \qquad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1 \tag{3.25}$$

เมื่อ Q_1 คือ จำนวนของจุดควอดราเจอร์สำหรับ θ_{s_1} และ $\nu_1^{q_1}$ คือ พารามิเตอร์ที่สัมพันธ์กับตำแหน่งของจุดควอดราเจอร์ ในช่วง $[-1,1]$ มาจากสูตรอินทิกรัลของเกาส์เซียน (Carnahan et al., 1969)

ขั้นตอนที่ 4. หาขอบเขตดำเนินการของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 2 (θ_{s_2})

$$\max_{\theta_{s_2}^{U_{q1}},\theta_{s_2}^{L_{q1}}} \{\theta_{s_2}^{U_{q1}} - \theta_{s_2}^{L_{q1}}\}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}_2^{U_{q1}}[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{U_{q1}},\theta_d] \le \mathbf{0} \tag{3.26}$$
$$\mathbf{f}_2^{L_{q1}}[\mathbf{d},\mathbf{z}(.),\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{L_{q1}},\theta_d] \le \mathbf{0}$$

เมื่อ $\theta_{s_2}^{U}$ แทน ค่าขอบบนของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 2 ที่สอดคล้องกับข้อจำกัด

$\theta_{s_2}^{L}$ แทน ค่าขอบล่างของความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 2 ที่สอดคล้องกับข้อจำกัด

$\theta_{s_2}^{q_1}$ แทน ความไม่แน่นอนแบบสโตแคสติกตัวที่ 1 ที่จุดควอเดเตอร์ q_1

$\mathbf{f}_2^{U_{q1}}$ แทน ฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_{s_2}^{q1}$ และ $\theta_{s_2}^{U_{q1}}$

$\mathbf{f}_2^{L_{q1}}$ แทน ฟังก์ชันข้อจำกัด $\mathbf{f}$ ที่แทนความไม่แน่นอนด้วยค่าเท่ากับ $\theta_{s_2}^{q1}$ และ $\theta_{s_2}^{L_{q1}}$

$\mathbf{z}(.)$ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรควบคุมที่ช่วยแต่ละข้อจำกัด

ขั้นตอนที่ 5. หาจุดควอดราเจอร์สำหรับ θ_2 ดังสมการ (3.27) นำคำตอบ $\theta_{s_2}^{U_{q1}},\theta_{s_2}^{L_{q1}}$ ที่ได้จากขั้นที่ 4 มาหาจุดควอดราเจอร์ในปริภูมิ (space) ของ θ_2 จาก

$$\theta_{s_2}^{q_1q_2} = 0.5[\theta_{s_2}^{U_{q1}}(1+\nu_2^{q_2})+\theta_{s_2}^{L_{q1}}(1-\nu_2^{q_2})], \quad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1,\ q_2 = 1,2,\ldots,Q_2 \tag{3.27}$$

ขั้นตอนที่ 6. ออปติไมซ์หาค่าคาดหวังของค่าใช้จ่าย $\overline{C}^k,\mathbf{d}^{new}$ ซึ่งมีขั้นตอนย่อย ๆ ดังนี้

ขั้นตอนที่ 6.1 กำหนดขอบเขตของ $\theta_d^L \le \theta \le \theta_d^U$

ขั้นตอนที่ 6.2 สร้างภาพหาสถานการณ์ปกติ, ดีที่สุด และเลวที่สุด $\theta_d^p (p = 1,2,3)$

ขั้นตอนที่ 6.3 กำหนดแฟกเตอร์น้ำหนักของแต่ละสถานการณ์ $\sigma^p (p = 1,2,3)$

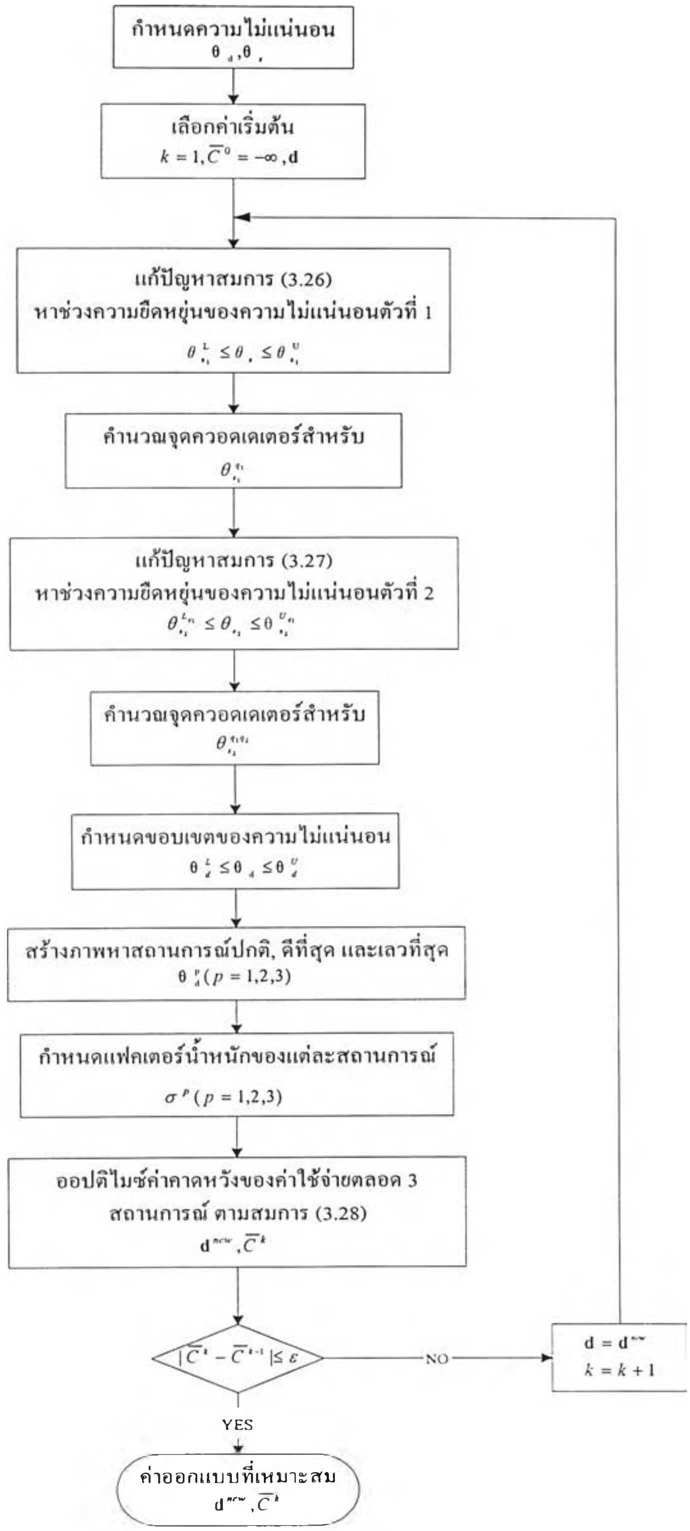
ขั้นตอนที่ 6.3 ออปติไมซ์รวมทั้งสองแบบผสมกัน

$$\min_{\mathbf{d},\mathbf{z}^{q1q2p}}\left\{\frac{\theta_{s_1}^{U}-\theta_{s_1}^{L}}{2}\sum_{q_1=1}^{Q_1}w_1^{q_1}\frac{\theta_{s_2}^{U_{q1}}-\theta_{s_2}^{L_{q2}}}{2}\sum_{q_2=1}^{Q_2}w_2^{q_2}[\sum_{p=1}^{3}\sigma^p C(\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1q_2p},\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{q_1q_2},\theta_d^p)]J(\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{q_1q_2})\right\}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{f}(\mathbf{d},\mathbf{z}^{q_1q_2p},\theta_{s_1}^{q_1},\theta_{s_2}^{q_1q_2},\theta_d^p) \le \mathbf{0}, \quad q_1 = 1,2,\ldots,Q_1,\ q_2 = 1,2,\ldots,Q_2 \tag{3.28}$$

ขั้นตอนที่ 7. กลับไปคำนวณขั้นตอนที่ 2 ใหม่อีกครั้ง โดยให้ $\mathbf{d} = \mathbf{d}^{new}$ และ $k = k+1$ จนกระทั่ง $\left|\overline{C}^k - \overline{C}^{k-1}\right| \le \varepsilon$ แล้วจึงหยุด จะได้ค่าคำตอบที่เหมาะสมออกมา

สำหรับการคำนวณของปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนแบบผสมทั้งสโตแคสติกและดีเทอร์มินิสติกแสดงในรูปไดอะแกรมได้ดังรูปที่ 3.4 ดังนี้



รูปที่ 3.5 ไดอะแกรมวิธีแก้ปัญหาออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนแบบผสมดีเทอร์มินิสติกและสโตแคสติก

3.4 การโปรแกรมควอดราติกอย่างเป็นลำดับ (Successive quadratic programming : SQP)

SQP หรือบางทีอาจเรียก sequential หรือ recursive quadratic programming ซึ่งเป็นวิธีการออปติไมซ์ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่เป็นสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการควอดราติด ซึ่งเป็นลักษณะที่เกิดขึ้นในปัญหาทั่วไป แล้วหาจุดต่ำสุดหรือต่ำสุดของสมการควอดราติก โดยมีข้อจำกัดที่เป็นสมการเชิงเส้น ที่ได้จากการประมาณเชิงเส้น (linearization) สำหรับการพัฒนาของวิธี SQP นั้น เริ่มต้นจาก Wilson (1963) ได้เขียนโปรแกรม SOLVER ที่ใช้สำหรับแก้ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่ไม่เชิงเส้นเป็นสมการควอดราติก และอาศัยการประมาณแบบเชิงเส้นช่วยประมาณสมการข้อจำกัดให้เป็นสมการเชิงเส้น ซึ่งนับว่าเป็นหลักการของ SQP การพัฒนาต่อมา Han (1977) และ Powell (1978) ได้เสนอให้ใช้วิธีกึ่งนิวตัน (Quasi-Newton method) ช่วยในการปรับปรุงค่าเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรังท์เกียน (Hessian of the Lagrangian) เพื่อเพิ่มประสิทธิภาพของ SQP ใช้ลู่เข้าแบบซูบเปอร์เชิงเส้น (superlinear) สำหรับประสิทธิภาพของ SQP นั้น Schittowski (1985) ได้แสดงความถูกต้องในการหาคำตอบ และจำนวนครั้งที่หาคำตอบได้ของ SQP เปรียบเทียบกับวิธีการออปติไมซ์แบบไม่เชิงเส้นวิธีต่าง ๆ

หลักการ SQP จะเป็นวิธีการแก้ปัญหา Quadratic programming: QP อย่างเป็นลำดับ จนกว่าจะลู่เข้าคำตอบที่เหมาะสม หรือไม่มีการเปลี่ยนแปลงของคำตอบ สำหรับ QP นั้นจะมีลักษณะของข้อจำกัดเป็นเชิงเส้น แต่ออปเจกทีฟฟังก์ชันเป็นสมการควอดราติด ดังนั้น QP จะต่างจากการโปรแกรมแบบเชิงเส้น (LP) ตรงที่สมการออปเจกทีฟฟังก์ชันของปัญหา QP มีเทอมหนึ่งประกอบด้วยตัวแปรกำลังสองหรือตัวแปร 2 ตัวคูณกัน ซึ่ง QP เป็นลักษณะที่เกิดในปัญหาเกี่ยวข้องกับการหาจุดต่ำสุดและสูงสุดโดยทั่วไป จึงมีบทบาทสำคัญในหาคำตอบของสมการไม่เชิงเส้นในวิธีของ SQP

สำหรับในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรมแม็ทแลบ (MATLAB) ซึ่งมีทูลบ็อกซ์ (Toolbox) สำหรับช่วยออปติไมซ์หาจุดที่เหมาะสมของปัญหาไม่เชิงเส้น โดยการเรียกใช้ฟังก์ชันคำสั่ง constr.m (Grace, 1993) ซึ่งมีลักษณะอัลกอรีธึมแบบ SQP ที่เป็นวิธีออปติไมซ์สำหรับปัญหาข้อจำกัดไม่เชิงเส้นที่มีประสิทธิภาพสูง ใช้การคำนวณซ้ำ (iteration) น้อยกว่าวิธีอื่น และเป็นวิธีนิยมในปัจจุบัน แสดงขั้นตอนการคำนวณของ SQP ได้ดังนี้ เริ่มจากพิจารณาปัญหาออปติไมซ์ (3.29)

$$\min_{\mathbf{x}} \; C(\mathbf{x})$$

โดยมีเงื่อนไข

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \tag{3.29}$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$$

เมื่อ $\mathbf{x}$ แทน เวคเตอร์ของตัวแปรตัดสินใจ

$C(\mathbf{x})$ แทน สมการออปเจกทีฟฟังก์ชันซึ่งเป็นความสัมพันธ์ของ $\mathbf{x}$

$\mathbf{h}(\mathbf{x})$ แทน เวคเตอร์ข้อจำกัดที่เป็นสมการ: $[h_1, h_2, \ldots, h_l]^T$

$\mathbf{g}(\mathbf{x})$ แทน เวคเตอร์ข้อจำกัดที่เป็นอสมการ : $[g_1, g_2, \ldots, g_m]^T$

อัลกอริธึมของ SQP ในฟังก์ชัน constr.m (Grace, 1993) สำหรับแก้ปัญหาสมการที่ (3.29) ประกอบด้วย 5 ขั้นตอนดังนี้

1. **ขั้นเริ่มต้น** กำหนดให้ค่าเริ่มต้นของการคำนวณขั้นที่ 1 $k = 0$, ค่าเริ่มต้นตัวแปรตัดสินใจ: $\mathbf{x}^0$, ค่าเริ่มต้นของเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรังท์เกียน $\mathbf{B}^0$ โดยทั่วไปจะกำหนดให้ $\mathbf{B}^0$ เป็นเมตริกซ์เอกลักษณ์ (Identity matrix)
2. **แก้ปัญหา QP** (Quadratic programming) โดยประมาณออปเจกทีฟฟังก์ชันเป็นสมการควอดราติก และทำการประมาณเชิงเส้นสมการข้อจำกัด เพื่อหาทิศทางของคำตอบในทางที่จะให้ฟังก์ชันลดลง (descent direction: $\mathbf{s}$) ในกรณีหาค่าต่ำสุดของฟังก์ชัน C โดยมีข้อจำกัดที่เป็นสมการคือ $\mathbf{h}$ และมีข้อจำกัดที่เป็นอสมการคือ $\mathbf{g}$ ซึ่งจากปัญหาสมการ (3.28) สามารถเขียนอยู่ในรูปปัญหาย่อย QP (quadratic programming subproblem) ได้ดังนี้

$$\min_{\mathbf{s}} \ \nabla C(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\mathbf{s} + \frac{1}{2}\mathbf{s}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}\mathbf{s}$$

โดยมีเงื่อนไข
$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) + \nabla\mathbf{h}(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\mathbf{s} = \mathbf{0} \tag{3.30}$$
$$\mathbf{g}(\mathbf{x}) + \nabla\mathbf{g}(\mathbf{x}^{\mathrm{T}})\mathbf{s} \leq \mathbf{0}$$

เมื่อ $\mathbf{s}$ แทน เวคเตอร์ทิศทางของคำตอบ

3. **หาระยะห่าง** (step length): α ของคำตอบที่เปลี่ยนไปตามทิศทางของเวคเตอร์ $\mathbf{s}$ นั้นคือจะได้คำตอบใหม่เท่ากับ $\mathbf{x}_{new} = \mathbf{x} + \alpha\mathbf{s}$ โดยใช้วิธีการออปติไมซ์ฟังก์ชัน 1 ตัวแปร เช่น quadratic interpolation หรือ cubic interpolation นั้นคือ ช่วยในการหาระยะห่าง α ของคำตอบในแต่ละขั้นตอนการคำนวณที่ทำให้ฟังก์ชันเมริท (Merit function) ตามสมการที่ (3.31) มีค่าต่ำสุด (Han และ Powell, 1977) นั้นคือประมาณฟังก์ชันเมริทด้วยฟังก์ชันควอดราติก หรือ คิวบิค ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่หาค่าต่ำสุดได้ง่าย แล้วหา α ที่ทำให้สมการควอเครติก หรือคิวบิคมีค่าต่ำที่สุด

$$\Psi(\mathbf{x}_{new}) = C(\mathbf{x}_{new}) + \sum_{i=1}^{l} \lambda_i |h_i(\mathbf{x}_{new})| + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j (\max[0, g_j(\mathbf{x}_{new})]) \tag{3.31}$$

4. **ปรับปรุงค่าเฮซเซียนเมตริกซ์ของฟังก์ชันลากรังท์เกียน** (Hessian of the Lagrangian): $\mathbf{B}$ สำหรับการคำนวณซ้ำ (iteration) ในขั้นต่อไป โดยใช้วิธี BFGS (Broyden, Flectcher, Goldfarb และ Shanno, 1970) ตามสมการ (3.29) ช่วยประมาณค่า $\mathbf{B}_{new}$ เพื่อใช้ในการคำนวณขั้นต่อไป

$$\mathbf{B}_{new} = \mathbf{B} + \frac{\gamma\gamma^T}{\gamma^T\mathbf{P}} - \frac{\mathbf{BPP}^T\mathbf{B}}{\mathbf{P}^T\mathbf{BP}} \quad (3.32)$$

เมื่อ **P** แทน เวคเตอร์ผลต่างระหว่างตัวแปรตัดสินใจขั้นตอนใหม่กับขั้นตอนเก่า

$$\mathbf{P} = \mathbf{x}_{new} - \mathbf{x} \quad (3.33)$$

γ แทน ผลต่างของ gradient of the Lagrangian

$$\gamma = \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}_{new}) - \nabla_{\mathbf{x}} L(\mathbf{x}) \quad (3.34)$$

และ L แทนฟังก์ชันลากรังท์เกียน โดยมี λ คือตัวคูณฟังก์ชันลากรังท์เกียน (Lagrangian multiplier)

$$L = C(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{l} \lambda_i h_i(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j g_j(\mathbf{x}) \quad (3.35)$$

5. **กลับไปขั้นที่ 2 จนกระทั่งคำตอบจะลู่เข้า** โดยใช้เกณฑ์ตามสมการที่ (3.36), (3.37) และ (3.38) เป็นเกณฑ์ในการหยุด

$$\frac{\left\|\mathbf{x}_{new} - \mathbf{x}\right\|}{\mathbf{x}_{new}} < \varepsilon_1 \quad (3.36)$$

และ $$|\mathbf{s}^T \nabla C| < \varepsilon_3 \quad (3.37)$$

และ $$\max\{h_j(\mathbf{x}_{new})\} < \varepsilon_2 \quad (3.38)$$

เมื่อ $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ และ ε_3 เป็นค่าความผิดพลาดที่ยอมรับได้ของแต่ละเกณฑ์ โดยมีค่าเท่ากับ 1×10^{-4}, 1×10^{-4} และ 1×10^{-6} ตามลำดับ

3.4 บทสรุป

การออปติไมซ์ภายใต้ความไม่แน่นอนของกระบวนการเคมีนั้นเป็นการออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอน คือขั้นแรกจะเป็นการออปติไมซ์ก่อนปฏิบัติการ หรือขั้นออกแบบ จะหาตัวแปรออกแบบ **d** ที่จะคงที่ตลอดในขณะปฏิบัติการ ส่วนขั้นที่ 2 จะเป็นการออปติไมซ์ขณะปฏิบัติการ หาตัวแปรควบคุม **z** ที่จะปรับเปลี่ยนตามค่าความไม่แน่นอนที่เกิดขึ้นในกระบวนการ

จากลักษณะของความไม่แน่นอนที่แทนลงในปัญหาออปติไมซ์ทำให้การออปติไมซ์แบบ 2 ขั้นตอน ถูกแยกเป็น 2 แบบคือ

- แบบดีเทอร์มินิสติกจะกำหนดให้ความไม่แน่นอนเป็นแบบขอบเขตที่ชัดเจน มีค่าเฉพาะและมีจำนวนจำกัด แล้วจะใช้วิธีสร้างภาพ (scenario) ของความไม่แน่นอนที่จะเกิดขึ้นไว้เป็น 3 สถานการณ์ด้วยกัน คือความไม่แน่นอนสถานการณ์ที่ทำให้ออปเจกทีฟฟังก์ชันมีค่าดีที่สุด (Best), ความไม่แน่นอนที่ค่าปกติ (Normal) และความไม่แน่นอนที่ทำให้ออปเจกทีฟฟังก์ชันมี

ค่าเลวที่สุด (Worst) แล้วนำฟังก์ชันออปเจกทีฟทั้งสามสถานการณ์นั้นมาคำนวณค่าคาดหวังหรือค่าเฉลี่ย ยกตัวอย่างเช่นกรณีออปเจกทีฟฟังก์ชันคือฟังก์ชันค่าใช้จ่าย จะนำค่าใช้จ่ายในสถานการณ์ของความไม่แน่นอนทั้ง ดี ปกติ และเลว มาคำนวณหาค่าใช้จ่ายคาดหวัง โดยก่อนการออปติไมซ์จะต้องกำหนดค่าแฟกเตอร์น้ำหนักหรือความน่าจะเป็นของโอกาสที่จะเกิดขึ้นของแต่สถานการณ์ของความไม่แน่นอน แล้วออปติไมซ์หาตัวแปรออกแบบที่ทำให้ค่าใช้จ่ายคาดหวังที่ต่ำที่สุดได้

- แบบสโตแคสติกจะกำหนดให้ความไม่แน่นอนเป็นตัวแปรเฟ้นสุ่ม กระจายแบบฟังก์ชันแจกแจงความน่าจะเป็นแบบต่อเนื่อง และไม่ทราบขอบเขตของความไม่แน่นอน วิธีนี้ขั้นเริ่มแรกจะค่าช่วงยืดหยุ่น (feasible range) ของความไม่แน่นอนก่อน กล่าวคือ หาช่วงของความไม่แน่นอนสูงสุดที่ทำให้ระบบอยู่ในสภาวะคงที่ และสอดคล้องกับข้อจำกัดต่าง ๆ ของระบบ ตลอดทุกค่าของความไม่แน่นอนภายในช่วงที่หานี้ แล้วใช้การอินทิกรัลของเกาส์เซียนเข้ามาช่วยในการออปติไมซ์ฟังก์ชันค่าใช้จ่ายคาดหวัง คำนวณซ้ำจนกระทั่งฟังก์ชันค่าใช้จ่ายคาดหวังจะลู่เข้า หรือไม่มีการเปลี่ยนแปลง จึงจะได้ค่าตัวแปรออกแบบ และช่วงของตัวแปรควบคุมที่เหมาะสม