# บทที่ 2
# ทฤษฎี และผลงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

## 2.1 การเลียนแบบกระบวนการ (Process simulation)

การเลียนแบบกระบวนการ หรือ การจำลองแบบปัญหา เป็นวิธีการหนึ่งซึ่งใช้ในกระบวนการแก้ปัญหาในด้านต่างๆ แต่ที่ได้รับการสนใจ และตื่นตัวในการนำมาใช้แก้ปัญหาในสาขาอาชีพต่างๆ อย่างแพร่หลายในปัจจุบันนั้น เป็นผลเนื่องมาจากความเจริญก้าวหน้าทางเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ Shannon (1975) กล่าวว่า "การเลียนแบบกระบวนการ คือกระบวนการออกแบบแบบจำลอง (Model) ของระบบงานจริง (Real System) แล้วดำเนินการทดลองใช้แบบจำลองนั้น เพื่อการเรียนรู้พฤติกรรมของระบบงาน หรือเพื่อประเมินผลการใช้กลยุทธ (Strategies) ต่างๆ ในการดำเนินงานของระบบภายใต้ข้อกำหนดที่วางไว้" นั้นหมายถึง กระบวนการของการจำลองแบบปัญหานั้นแบ่งเป็นสองส่วน คือ การสร้างแบบจำลองส่วนหนึ่ง และการนำเอาแบบจำลองนั้นไปใช้งานเชิงวิเคราะห์อีกส่วนหนึ่ง ดังนั้นจะเห็นได้ว่า กลไกของวิธีการของการเลียนแบบกระบวนการขึ้นอยู่กับแบบจำลอง และการใช้แบบจำลอง แบบจำลองที่ใช้ในการจำลองกระบวนการนี้ อาจเป็นระบบวัตถุ หรือแนวความคิดลักษณะใดลักษณะหนึ่ง แต่ต้องสามารถช่วยให้เข้าใจในระบบงานจริง เพื่อประโยชน์ในการอธิบายพฤติกรรม และเพื่อการปรับปรุงการดำเนินงานของระบบงาน หรือกระบวนการจริง

ในปัจจุบันการเลียนแบบกระบวนการถูกนำมาใช้กันอย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมต่างๆ สำหรับอุตสาหกรรมเคมี (Chemical Process Industries, CPI) การเลียนแบบกระบวนการถูกนำมาใช้ทั้งในขั้นตอนการออกแบบ และขั้นตอนการดำเนินงาน กล่าวคือในขั้นตอนการออกแบบจะมุ่งความสนใจไปที่ การทำนาย การสมดุลมวล และพลังงานของวัตถุดิบ หรือผลิตภัณฑ์หลักๆ ต้นทุนอุปกรณ์ และอื่นๆ อีกมากมาย ซึ่งมักจะเกี่ยวข้องกับทางเศรษฐศาสตร์ ส่วนในขั้นตอนการดำเนินงานจะตรงกันข้ามกัน คือ นอกจากจะมุ่งความสนใจไปที่ปริมาณ และคุณภาพของผลิตภัณฑ์แล้ว ยังเกี่ยวกับการเกิดปัญหาเฉพาะหน้า (Troubleshooting) ของโรงงาน ความสามารถในการควบคุม (Controllability) และการบำรุงรักษา (Dimian, 1994) เพื่อลดต้นทุน รักษาศักยภาพการผลิต และเพิ่มความสามารถในการแข่งขันทางการค้า

การเลียนแบบกระบวนการส่วนใหญ่อาศัยซอฟต์แวร์ หรือแพคเกจการเลียนแบบกระบวนการ (Simulation Packages) เป็นเครื่องมือในการคำนวณ และให้วิศวกรเรียนรู้ ประกอบกับความ

ก้าวหน้าด้านคอมพิวเตอร์ที่เจริญรุดหน้าไปอย่างรวดเร็ว ทำให้ปัจจุบันการจำลองแบบปัญหา หรือการจำลองกระบวนการด้วยคอมพิวเตอร์เป็นวิธีที่นิยมที่สุด (Gallier และ Kisala, 1987; Dimian, 1994; Glasscock และ Hale, 1994) อีกทั้งตัวเลียนแบบกระบวนการ ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองมีให้เลือกมากมาย มีความยืดหยุ่นสูง สามารถประยุกต์ใช้กับอุตสาหกรรมหลายประเภท จึงมีการนำไปใช้อย่างแพร่หลายในประเทศอุตสาหกรรม Dimian (1994) กล่าวว่า แพคเกจการเลียนแบบกระบวนการเปรียบเสมือน "กระจกเงา" สะท้อนพฤติกรรมของกระบวนการ ภายใต้การเปลี่ยนแปลงเงื่อนไขการดำเนินงาน หรือการเปลี่ยนแปลงวัตถุดิบ และคุณภาพของผลิตภัณฑ์ ในหลายๆ กรณี การเลียนแบบกระบวนการกำลังจะมาแทนที่การจำลองย่อส่วน (Pilot-Scale) มากขึ้น หรือเป็นตัวประกอบช่วยให้ส่วนอื่นๆ ที่เหลือสมบูรณ์ขึ้น (Glasscock และ Hale, 1994) เช่น กระบวนการที่เกี่ยวข้องกับของแข็ง และสายป้อนกลับ อาจยังจำเป็นต้องทำการจำลองย่อส่วนอยู่ แต่การเลียนแบบกระบวนการจะถูกนำมาใช้ในส่วนที่สำคัญระหว่างการวางแผนการทดลองเหล่านั้น

เหตุผลที่ต้องสร้างแบบจำลองเลียนแบบกระบวนการแทนการทดลองกับกระบวนการจริง สรุปได้ดังนี้ (Thongpraserd, 1996)

1) เพราะว่าการทดลองกับกระบวนการจริง อาจก่อให้เกิดความขัดข้องในการดำเนินตามปกติ

2) เพราะว่าในการทดลองกับกระบวนการจริงนั้นเป็นการยากที่จะควบคุมเงื่อนไขต่างๆ ของการทดลองให้คงที่ ทำให้ผลการทดลองที่ได้แต่ละครั้งของการทดลอง อาจไม่ใช้ผลที่เกิดขึ้นภายใต้เงื่อนไขกลุ่มเดียวกัน

3) เพราะว่าการทดลองกับกระบวนการจริงอาจจะต้องใช้เวลา และค่าใช้จ่ายจำนวนมากจึงจะได้ข้อมูลเพียงพอสำหรับการวิเคราะห์

4) เพราะว่าการทดลองกับกระบวนการจริง อาจจะเป็นไปไม่ได้ที่จะทดลองกับเงื่อนไขทุกรูปแบบที่ต้องการ

จากอุปสรรคต่างๆ ที่เกิดขึ้น ทำให้ไม่สามารถทำการทดลองกับระบบงานจริงได้ จึงต้องใช้การจำลองกระบวนการในการช่วยแก้ปัญหา

อย่างไรก็ตามการใช้ซอฟต์แวร์ และคอมพิวเตอร์นั้น ผู้ใช้จะต้อง 1) มีความเข้าใจเกี่ยวกับปัญหาดีพอ และสามารถเขียนสมการทางคณิตศาสตร์ของปัญหานั้นๆได้ 2) รู้ชัดเจนว่าฟังก์ชันจุดประสงค์ หรือสมการที่ต้องการคืออะไร ไม่ว่าจะเป็นกำไรสูงสุดหรือว่าต้นทุนวัตถุดิบ และพลังงานน้อยที่สุด และ3) ผู้ใช้ต้องมีประสบการณ์ หรือมีความสามารถในการตีความคำตอบที่ได้จากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ เพื่อที่จะแยกแยะ และตัดสินใจในการนำผลที่ได้นี้ไปใช้

**2.2 การปรับให้สอดคล้องของข้อมูล (Data Reconciliation)**

การจำลองกระบวนการ หรือแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ ถูกนำมาใช้อย่างกว้างขวางในหมู่วิศวกรโรงงาน และผู้วางแผนการผลิต เพื่อให้เข้าใจกระบวนการที่สนใจดีขึ้น การเลียนแบบกระบวนการเหล่านี้ใช้เป็นคำตอบของคำถามต่างๆ เช่น อัตราการป้อนเข้าเพิ่มขึ้นได้อย่างไร ปรับปรุงผลได้ (Yield) ได้อย่างไร พลังงานที่ใช้ลดลงได้อย่างไร จะกำหนดตัวแปรอิสระอย่างไรให้ได้กำไรมากที่สุด ถึงแม้ว่าการเลียนแบบกระบวนการในปัจจุบันจะถูกพัฒนาขึ้นมากก็ตาม แต่มีหลายมูลเหตุที่ทำให้การเลียนแบบกระบวนการไม่สอดคล้องกับโรงงานจริง Sowell (1998) สรุปสาเหตุที่ทำให้การเลียนแบบกระบวนไม่ใกล้เคียงความจริงไว้ 3 ประการ คือ

ประการที่หนึ่งสาเหตุจากระบบการเลียนแบบกระบวนการ (Simulation Effects) หรือความคลาดเคลื่อนที่ติดมากับตัวเลียนแบบ (Inherent Error) เป็นสาเหตุที่อย่างน้อยด้วยเทคโนโลยีปัจจุบันยังไม่สามารถกำจัดออกไปได้ ยกตัวอย่างเช่น ในแบบจำลองหอกลั่นใช้ทฤษฎีสมดุลของไอและของเหลวซึ่งมีการแยกอย่างสมบรูณ์ แต่ในความเป็นจริงแต่ละชั้นในหออาจมีการแยกไอ และของเหลวไม่สมบูรณ์ นอกจากนี้สมมุติฐานทฤษฎีสมดุลไอ และของเหลวของชั้นต่างๆ ในการเลียนแบบกระบวนการยังมีผลกระทบต่อ ตำแหน่งของชั้น ตำแหน่งชั้นที่ป้อนเข้า ประเภทของเครื่องต้มซ้ำ และประเภทของเครื่องควบแน่น (เครื่องควบแน่นบางส่วน (Partial Condenser) อยู่ที่สมดุลในแบบจำลอง แต่ในโรงงานอาจไม่เป็นเช่นนั้น) หรือในโรงงานมักจะมีส่วนของของเหลวติดไปกับไอ เกิดฟอง และเกิดการรั่วซึมบนชั้น แต่ในแบบจำลองจะเป็นการแยกมวลสารอย่างสมบูรณ์ ทำให้อุณหภูมิ หรือองค์ประกอบของสารจริงไม่สอดคล้องกับผลจากการเลียนแบบ ตัวอย่างในส่วนของปฏิกิริยาจนล์ศาสตร์ เช่น ตัวเลียนแบบกระบวนการจะประมาณกลไกของปฏิกิริยา ซึ่งในความจริงมีปฏิกิริยาเกิดขึ้นมากมาย แต่ในการเลียนแบบจึงต้องเลือกปฏิกิริยาที่สำคัญๆ เท่านั้น เพราะยิ่งมีสมการปฏิกิริยาจำนวนมาก เวลาในการแก้ปัญหาก็มากขึ้นด้วย แต่หากสมการปฏิกิริยาน้อยเกินไปหรือข้อมูลอัตราการเกิดปฏิกิริยาไม่ถูกต้อง ผลที่คำนวณได้ก็ผิดไปด้วย ยกตัวอย่างเช่น ปฏิกิริยาอัลคิลเลชั่น (Alkylation reactions) ในหน่วยกลั่นอัลคิลเลชั่น มีปฏิกิริยาพื้นฐานง่ายๆ ไม่กี่ปฏิกิริยา คือ ปฏิกิริยาที่ต้องการได้แก่ ปฏิกิริยาการเกิดพาราฟินที่มีโครงสร้างเป็นกิ่งก้านสาขา ซึ่งประกอบด้วยคาร์บอน 8 อะตอมจากการทำปฏิกิริยาของไอโซบิวเทน และไอโซเมอร์ของบิวทีน ซึ่งมีกรดเป็นตัวเร่งปฏิกิริยา และปฏิกิริยาการเกิดพาราฟินที่ประกอบด้วยคาร์บอน 7 อะตอม จากการทำปฏิกิริยาของไอโซบิวเทนกับโพรพีลีน อย่างไรก็ตามปฏิกิริยาที่ไม่พึงปรารถนาก็เกิดขึ้นด้วย ซึ่งจะได้พอลีเมอร์ชนิดอื่น หรือพวกอัลคิลเลท (Alkylate) ที่มีน้ำหนักโมเลกุลสูงๆ ส่วนปฏิกิริยาอื่นๆ ก็จะได้ผลิตภัณฑ์ลักษณะเป็นน้ำมันละลายปะปนในตัวเร่งปฏิกิริยากรด ซึ่งเป็นปฏิกิริยาที่ไม่ต้องการเกิดขึ้นด้วยเช่นกัน

ประการที่สองสาเหตุจากการสุ่มตัวอย่าง และการวิเคราะห์ (Sampling and Analysis Effects) หรือความคลาดเคลื่อนจากการวัด (Measurement Error) เกิดจากการสุ่มตัวอย่าง และการวิเคราะห์ ข้อมูลที่ใช้ในการเทียบมาตรฐาน (Calibration) หรือการคำนวณของตัวเลียนแบบไม่สมบูรณ์ ความคลาดเคลื่อนเหล่านี้มาจากเทคนิคการสุ่มตัวอย่าง เนื่องจากตัวอย่างที่สุ่มไม่สามารถใช้เป็นตัวแทนได้ และมาจากความคลาดเคลื่อนจากการวิเคราะห์ด้วย ยกตัวอย่างเช่นการเก็บตัวอย่าง มักจะใช้ในการแสดงค่าของสายป้อน และผลิตภัณฑ์ ส่วนการเก็บตัวอย่างขององค์ประกอบอื่นๆ ในสายกระบวนการไม่ค่อยได้ใช้นัก เนื่องจากปัญหาด้านเวลา และต้นทุน ซึ่งในโรงงานจริงสายป้อน และส่วนประกอบของผลิตภัณฑ์อาจมีการเปลี่ยนแปลงอย่างต่อเนื่อง สิ่งนี้อาจส่งผลกระทบอย่างมากในการเลียนแบบก็ได้ และการวิเคราะห์ข้อมูลจากห้องปฏิบัติการเองก็ยังมีความคลาดเคลื่อนติดมาด้วย เช่น ความสามารถในการลอกแบบ (Reproducibility) ความสามารถในการทำซ้ำ (Repeatability) ความสามารถในการลอกแบบเป็นความคลาดเคลื่อนระหว่างการวิเคราะห์ซึ่งใช้วิธีการวิเคราะห์ และตัวอย่างเดียวกัน แต่ทำในห้องปฏิบัติการคนละแห่ง และความสามารถในการทำซ้ำ เป็นความคลาดเคลื่อนระหว่างการวิเคราะห์ที่เกิดขึ้นในห้องปฏิบัติการเดียวกันโดยผู้วิเคราะห์เดียวกัน เครื่องมือเดียวกัน และใช้วิธีการวิเคราะห์เดียวกันบนตัวอย่างเดียวกัน นอกจากนี้ในการวิเคราะห์ตัวอย่างอาจต้องใช้เวลาสองสามชั่วโมงในการเก็บตัวอย่าง แล้วส่งไปยังห้องปฏิบัติการเพื่อแจ้งผลไปยังผู้ปฏิบัติงานในโรงงาน หรือ คอมพิวเตอร์ ในหลายกรณีระยะเวลาตั้งแต่การเก็บตัวอย่างจนได้ผลออกมานั้นใช้เวลาเป็นวัน ขณะที่ผู้ปฏิบัติการในโรงงานรอผลจากห้องปฏิบัติการก็ไม่สามารถทำอะไรได้ ปัญหานี้ถูกแก้ไขโดยการใช้ ตัววิเคราะห์กระบวนการแบบออนไลน์ (Online Process Analyzers) แล้วสรุปผลการคำนวณภายหลัง ตัววิเคราะห์กระบวนการแบบออนไลน์แม้จะทำงานได้อย่างมีประสิทธิภาพ แต่ต้นทุนในการติดตั้ง การดูแลรักษาสูง และการสรุปผลการคำนวณแม้จะมีความรวดเร็วมาก ไม่แพง แต่ก็มีข้อเสียในส่วนของความคลาดเคลื่อนที่ติดมา กล่าวคือถึงแม้จะใช้วิธีการในการคำนวณดีแต่ข้อมูลต่างๆ ที่ใช้ในการคำนวณก็อาจมีความคลาดเคลื่อนมากมายอยู่ก็ได้

ประการที่สามสาเหตุจากการนำไปใช้อย่างผิดๆ (Misapplication Effects) หรือความคลาดเคลื่อนจากติดตั้ง (Set-up Error) อันเนื่องจากผลกระทบจากการใช้ผิดทาง การติดตั้ง หรือการใช้ตัวเลียนแบบไม่เหมาะสมไม่ถูกทาง จะเห็นได้จากตัวอย่างมากมายที่สามารถสังเกตเห็นความแตกต่างระหว่างผลการเลียนแบบกับโรงงานจริง ตัวเลียนแบบต่างๆ มักจะออกแบบมาเฉพาะเจาะจงกับกระบวนการหนึ่งๆ แต่ในโรงงานจริงอาจมีผังกระบวนการ หรือใช้อุปกรณ์ต่างออกไป ยกตัวอย่างเช่น หอสุญญากาศ (Vacuum Tower) ที่ใช้กันทั่วไปจะไม่มีเครื่องต้มซ้ำ (Reboiler) และเครื่องควบแน่น แต่จะใช้สายป้อนเป็นตัวให้ความร้อน และใช้ปั๊มวนซ้ำ (Pumparound) ในการดึงความ

ร้อนออก เมื่อจำลองหอดังกล่าว ตัวเลียนแบบจะไม่สามารถเลียนแบบได้ เว้นแต่จะละเครื่องต้มซ้ำ และเครื่องควบแน่นไว้ โดยแทนค่าภาระกรรมต่ำมากๆ ประกอบกับผู้ใช้ตัวเลียนแบบขาดความเข้าใจก็อาจใช้ตัวเลียนแบบผิดๆ หรือในการออปติไมซ์เพื่อประโยชน์ทางเศรษฐศาสตร์ หากกำหนดราคาของสายต่างๆ ผิด คุณภาพ หรือ พลังงานที่คำนวณได้ก็จะมีความคลาดเคลื่อนมาก ยกตัวอย่าง เช่น ในโรงกลั่นน้ำมัน ราคาของสายต่างๆมักจะไม่ทราบจนกว่าจะถูกซื้อ หรือ ขายออกไป ราคาของสายเหล่านี้จะถูกคำนวณโดยวิธีการต่างๆ หากระบบการเลียนแบบมีการจำลองกระบวนการและใช้ตัวเลียนแบบเหมาะสม และมีการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลดีเยี่ยมแล้ว ความคลาดเคลื่อนทางเศรษฐศาสตร์ถือเป็นโมฆะ และด้วยเหตุผลนี้ทำให้ผู้ใช้บางคนไม่เลือกที่จะใช้ตัวแปรทางเศรษฐศาสตร์ในการออปติไมซ์ แต่จะไปพิจารณาการเพิ่มพารามิเตอร์อื่นๆ อย่างเช่น ผลได้ของผลิตภัณฑ์ที่ต้องการแทน นอกจากนี้ความคลาดเคลื่อนจากการออปติไมซ์ก็อาจเกิดขึ้นจากการเลือกเงื่อนไขบังคับ และตัวแปรปรับ อย่างเช่น การใช้เงื่อนไขบังคับผิด หรือค่าที่ใช้ในเงื่อนไขบังคับไม่ถูกต้องก็นำไปสู่ความคลาดเคลื่อนอย่างร้ายแรงได้ ส่วนการเลือกตัวแปรปรับที่เหมาะสมก็มีความสำคัญกันเช่นกัน

นอกจากนี้ยังมีผู้วิจัยอื่นๆ (เช่น Tjoa และ Beigler, 1991; Mah, 1990; Liebman และคณะ, 1992; Bagajewicz, 1995) กล่าวถึงความผิดพลาดจากการวัดไว้ พอสรุปได้ว่ากระบวนการวัดในอุตสาหกรรมเคมีบ่อยครั้งมักจะไม่สอดคล้องกับเงื่อนไขการสมดุลมวล และพลังงาน เนื่องจากความคลาดเคลื่อนสุ่ม (Random Errors) หรืออาจเกิดจากความคลาดเคลื่อนรวม (Gross Errors) จากตัวอุปกรณ์ ความโอนเอียงของอุปกรณ์ (Instrument Biases) การใช้อุปกรณ์ที่ไม่เหมาะสมกับหน้าที่ (Malfunctioning Measurement Devices) การติดตั้งอุปกรณ์ไม่ถูกต้อง (Incorrect Installation) การเทียบมาตรฐาน (Calibration) ความไม่แม่นยำ หรือไม่สมบูรณ์ของแบบจำลองกระบวนการ หรืออาจมีการรั่วไหลเกิดขึ้นในกระบวนการ ทำให้ผลที่ได้ไม่แม่นยำ และสรุปผลไม่ถูกต้อง

ดังนั้นจึงต้องมีการปรับความคลาดเคลื่อนจากการสุ่มในอุปกรณ์วัด เพื่อให้ค่าที่ปรับนั้นอยู่ในเงื่อนไขสมดุลมวล และพลังงาน ในรูปของความคลาดเคลื่อนยกกำลังสองถ่วงน้ำหนักถูกทำให้มีค่าน้อยที่สุด (Crowe, Garcia และ Hrymak, 1983; Piccolo และ Douglas, 1996) วิธีการนี้เรียกว่าการปรับให้สอดคล้องของข้อมูล

### 2.2.1 การเขียนสูตรสำหรับปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูล (Problem Formulation)

ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลแบ่งออกเป็นปัญหาแบบเชิงเส้น และไม่เชิงเส้น กรณีที่เป็นแบบเชิงเส้นอยู่บนสมมุติฐานที่ว่า สายการกระบวนการใดๆ ที่มีการวัดความเข้มข้น และอุณหภูมิ จะต้องมีการวัดอัตราการไหลด้วย (Crowe และคณะ, 1983) ส่วนแบบไม่เชิงเส้น สามารถ

ละสมมุติฐานนี้ได้ โดยการแทนผลลัพท์ต่างๆ ของตัวแปรที่ไม่ได้วัดในสมการสมดุล แล้วทำให้เป็นแบบไม่เชิงเส้น (Crowe, 1986) ในทั้งสองกรณีการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลเกี่ยวข้องกับการสร้างเมทริกซ์ที่เป็นตัวแทนของกระบวนการ Crowe (1986) เสนอการใช้ขั้นตอนวิธีเมทริกซ์โปรเจคชั่น (Matrix Projection Algorithm) เพื่อดึงตัวแปรที่ไม่ได้วัดทั้งหมดออกจากเมทริกซ์ของกระบวนการ วิธีการแก้ปัญหาของทั้งสองกรณีเกี่ยวข้องกับการลดเมทริกซ์ของกระบวนการ และลากรานจ์มัลติพลายเออร์ (Lagrange Multiplier) เพื่อให้เป็นไปตามกฎการอนุรักษ์ และเงื่อนไขบังคับ ในกรณีแบบไม่เชิงเส้นจะแก้ปัญหาโดยการคำนวณหลายๆ ครั้ง นอกจากนี้ยังมีงานวิจัยอื่นๆ ที่เสนอวิธีการแก้ปัญหาแบบไม่เชิงเส้นด้วยวิธีการต่างๆ ได้แก่ MacDonald และ Howat, 1988; Takiyama, Naka และ O'shima, 1991; Tjoa และ Biegler, 1991; Liebman และคณะ, 1992 เป็นต้น

ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลทั้งแบบเชิงเส้น และแบบไม่เชิงเส้น สามารถเขียนเป็นปัญหายกกำลังสองถ่วงน้ำหนักน้อยที่สุดในรูปสมการทางคณิตศาสตร์ได้เหมือนกัน ต่างกันที่ในกรณีปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลแบบไม่เชิงเส้นนั้น ทั้ง $h(x)$ และ$g(x)$ มักจะมีความสัมพันธ์แบบไม่เชิงเส้น ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลในรูปสมการทางคณิตศาสตร์เขียนได้ดังนี้ (Crowe และคณะ, 1983)

**เลือก** $x$

**มินิไมซ์** ความคลาดเคลื่อนยกกำลังสองถ่วงน้ำหนัก = $[\,(x-y)^T Q\,(x-y)\,]$ (2.1)

**โดยมีเงื่อนไข** $h(x) = 0$ และ $g(x) \geq 0$

เมื่อ $x$ คือ เวกเตอร์ของตัวแปรสอดคล้อง (Reconciled variables)

หรือ ตัวแปรจากการประมาณ

$y$ คือ เวกเตอร์ของตัวแปรวัด (Measured variables)

$Q$ คือ ส่วนกลับความแปรปรวนของตัวแปรวัด

$h(x)$ คือ เซตของสมการเงื่อนไขบังคับแบบเท่ากันในแบบจำลองกระบวนการ

$g(x)$ คือ เซตของสมการเงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากันในแบบจำลองกระบวนการ

และมีสมมุติฐานดังนี้

1. กระบวนการอยู่ที่สภาวะคงตัว
2. ในการวัดที่มีความคลาดเคลื่อนรวมอยู่ จะไม่รวมอยู่ในฟังก์ชันจุดประสงค์
3. ทราบความแปรปรวนของตัวแปรวัด
4. ความคลาดเคลื่อนสุ่มเป็นอิสระ มีการกระจายตัวแบบปกติ และมีค่าเฉลี่ยเป็นศูนย์

จะเห็นว่าการแก้ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูล ก็คือแก้ปัญหาการออปติไมซ์เพื่อหาค่าความคลาดเคลื่อนยกกำลังสองถ่วงน้ำหนักที่น้อยที่สุดนั้นเอง และวิธีการการแก้ปัญหาการ

ปรับให้สอดคล้องที่จะกล่าวดังต่อไปนี้ สามารถประยุกต์ใช้กับทั้งปัญหาแบบเชิงเส้น และไม่เชิงเส้นโดยไม่ต้องเขียนสมการสร้างแบบจำลองให้ยุ่งยาก และสะดวกรวดเร็ว วิธีนี้คือ การนำเอาข้อดีของซอฟต์แวร์การเลียนแบบกระบวนการที่มีความสามารถในการออปติไมซ์อยู่แล้วมาใช้ งานวิจัยต่างๆ ที่มีการนำแพคเกจการเลียนแบบกระบวนการไปใช้แก้ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูล อาทิเช่น

Stephenson และ Shewchuk (1986) แก้ปัญหาการปรับให้สอดคล้องในกระบวนการเยื่อกระดาษ โดยใช้โปรแกรมคำนวณแบบพร้อมกัน MASSBAL ซึ่งให้แบบจำลองกระบวนการที่ให้ผลใกล้เคียงกับตัวแปรวัดมาก

Piccolo และ Douglas (1996) แสดงตัวอย่าง และสาธิตการแก้ปัญหาโดยใช้แพคแก็จการเลียนแบบกระบวนการโดยใช้โปรแกรมต่างๆ อาทิ โปรแกรม Crowe โปรแกรม AspenPlus และโปรแกรม Gams

Chuaprasert และคณะ (1998) ใช้โปรแกรมคำนวณแบบเรียงลำดับ AspenPlus ในการแก้ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของข้อมูลของกระบวนการหม้อต้มระเหยน้ำตาล จำนวน 20 กะ (Batch) จากผลการทดลองแบบจำลองกระบวนการที่ได้มีความสอดคล้องกับตัวแปรวัดมากขึ้นอีก 60% โดยเฉลี่ยในแต่ละกะเป็นต้น

**2.3 การออปติไมซ์**

การออปติไมซ์ คือ เครื่องมือวิเคราะห์ที่สำคัญในกระบวนการตัดสินใจ ไม่ว่าจะเป็นปัญหาทางด้านการดำเนินงาน การออกแบบ การจัดการของโรงงานกระบวนการเคมี (รวมทั้งโรงงานอุตสาหกรรมอื่นๆ ด้วย) สามารถแก้ไขได้โดยการใช้การออปติไมซ์ การออปติไมซ์เป็นกระบวนการคิด และตัดสินใจทางวิทยาศาสตร์เพื่อหาคำตอบที่ดีที่สุดของปัญหา และเนื่องจากแรงจูงใจหลายด้าน ทั้งด้านเศรษฐกิจ และด้านเทคโนโลยี ซึ่งล้วนเป็นแรงจูงใจที่สำคัญ ออปติไมซ์เซชั่นจึงถูกนำมาใช้ในการแก้ปัญหามากมาย ตัวอย่างเช่น

1) การหาสภาวะการผลิตที่ดีที่สุดของหน่วยการผลิต อย่างเช่น เครื่องปฏิกรณ์เคมี หอกลั่น หอดูดซับเป็นต้น
2) การออกแบบกระบวนการของโรงงาน
3) การตรวจสอบความถูกต้องของข้อมูลของโรงงานที่ได้จากการวัด เพื่อนำมาใช้ประโยชน์อื่นๆ เช่น การสร้างแบบจำลองของกระบวนการผลิต
4) การหาเส้นทางการกระจายน้ำมันดิบ และผลิตภัณฑ์ของโรงกลั่น
5) การจัดสรรทรัพยากร หรือการใช้งานของหน่วยการผลิตต่างๆ

6) การออกแบบขนาด และวางผัง (Lay out) ของท่อส่ง

7) การหาทำเลที่ตั้งที่ดีที่สุดของโรงงาน

8) การลดค่าใช้จ่ายของการเก็บสินค้า หรือผลิตภัณฑ์

9) การหากำหนดการบำรุงรักษา และการทดแทนอุปกรณ์การผลิต

10) การวางแผน และทำกำหนดการเกี่ยวกับการก่อสร้าง

ตัวอย่างในอุตสาหกรรม อาทิเช่น

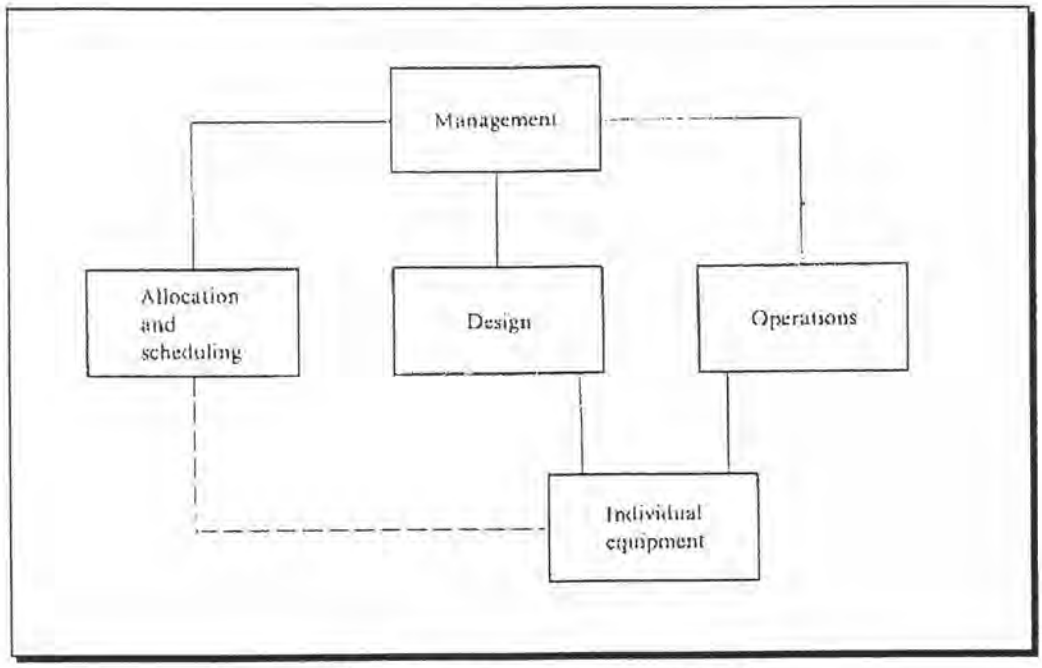
Gallier และ Kisala (1987) ทำออปติไมซ์โรงสังเคราะห์แอมโมเนีย ของบริษัท Toyo Engineering Corporation สามารถเพิ่มการผลิตแอมโมเนียมากขึ้น 12 %

Bailey, Hrymak, Treiber และ Hawkins (1993) ทำออปติไมซ์แบบไม่เชิงเส้นของกระบวนการแยกแก๊สไฮโดรคาร์บอน ของโรงงาน Sonoco ประเทศแคนาดา ซึ่งได้กำไรเพิ่มขึ้น 3.6 % หรือ 8,308 ดอลลาร์ในหนึ่งวัน

Wellons, Sapre, Chang และ Laird (1994) ทำออนไลน์ออปติไมซ์ของโรงกำเนิดพลังไฟฟ้าและไอน้ำของโรงกลั่นน้ำมันโมบิล สหรัฐอเมริกา สามารถประหยัดค่าใช้จ่ายได้ถึง 2 ล้านดอลลาร์ต่อปี

**2.4 ลำดับขั้นการออปติไมซ์ (Scope and Hierarchy of Optimization)**

การออปติไมซ์สามารถทำได้หลายลำดับนับตั้งแต่ การรวมกระบวนการที่ซับซ้อนของโรงงาน และการกระจายกระบวนการส่วนต่างๆให้ง่ายขึ้น เช่น หน่วยการผลิตย่อย ๆ อุปกรณ์การผลิตแต่ละชิ้น แม้กระทั่งระบบต่างๆ ภายในชิ้นส่วนของอุปกรณ์ โดยทั่วไปในอุตสาหกรรมมีปัญหาในด้านการออปติไมซ์อยู่ 3 ลำดับ (Edgar และHimmelblau, 1989) คือ (1) การจัดการ (2) การดำเนินการผลิต (3) การออกแบบเครื่องมือ และกระบวนการผลิต ดังรูปที่ 2.1




**รูปที่ 2.1** ลำดับต่างๆ ของการออปติไมซ์

กระบวนการตัดสินใจที่เกี่ยวกับการจัดการได้แก่ การวิเคราะห์โครงการ การเลือกผลิตภัณฑ์ที่จะผลิต งบประมาณของบริษัท การลงทุนทางด้านการตลาด และการวิจัยและพัฒนาการสร้างโรงงานใหม่

การดำเนินการผลิตเพื่อหาสมรรถนะการผลิตที่ดีที่สุด มักจะทำออปติไมซ์ค่อนข้างบ่อย และหมายถึงว่าวิศวกรต้องหาว่าสมรรถนะการผลิตที่ดีที่สุดในช่วงเวลาที่เป็นชั่วโมง วันหนึ่ง หรือสัปดาห์หนึ่ง หรือแม้กระทั่งในบางกรณีจะต้องทำการออปติไมซ์ทุกนาที การหาสมรรถนะการผลิตทางด้านการควบคุม คือ การหาเซ็ตพ้อยท์ของกระบวนการผลิต อย่างเช่น อุณหภูมิ ความดัน อัตราการไหลที่ดีที่สุด เมื่อสภาวะการตลาด หรือสภาวะการผลิตเปลี่ยนไป ทั้งนี้เพื่อให้มั่นใจได้ว่าการดำเนินงานทางด้านการผลิตอยู่ที่จุดที่ดีที่สุดตลอดเวลา นอกจากนั้นการดำเนินงานของโรงงานอาจเกี่ยวข้องกับการจัดสรรวัตถุดิบ การใช้สาธารณูปโภค เช่น ไอน้ำ หรือน้ำหล่อเย็น การขนส่ง การกระจาย หรือจัดส่งผลิตภัณฑ์โดยให้มีค่าใช้จ่ายต่ำสุด

และปัญหาทางด้านการออกแบบกระบวนการผลิต และอุปกรณ์การผลิตนั้นเกี่ยวกับการเลือกประเภทของการผลิต เช่น แบบกะ หรือแบบต่อเนื่อง การเลือกชนิดของเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อน เป็นต้น

Latour (1979) ได้ยกตัวอย่างตัวแปรที่น่าสนใจในกระบวน และอุปกรณ์ต่างๆ เพื่อหาสภาวะที่เหมาะสมในแต่ละลำดับการออปติไมซ์ และแบ่งลำดับการออปติไมซ์ไว้ 3 ระดับ คือ

1) การดำเนินงาน (Optimum Operating Conditions) 2) การจัดสรร (Optimum Allocation) 3) การกำหนดการ (Optimum Scheduling)

ในลำดับการดำเนิน ยกตัวอย่างเช่น หอกลั่น มีตัวแปรที่น่าสนใจ คือ สัดส่วนการรีฟลักซ์ (Reflux Ratio) การปนเปื้อนของสารหนัก และสารเบาที่ยอมรับได้ (Impurity) ความดัน อัตราการไหลสายป้อน และอุณหภูมิ ส่วนเตาเผาโอเลฟิน (Olefin Furnace) มีตัวแปรที่หน้าสนใจ เช่น อุณหภูมิ สัดส่วนของไอน้ำไฮโดรคาร์บอน (Steam Hydrocarbon Ratio) อัตราการป้อนไฮโดรคาร์บอนเป็นต้น

ในส่วนของการจัดสรร เช่น การหาขอบเขตการใช้เชื้อเพลิงในเตาเผา และหม้อกำเนิดไอน้ำ (Boiler) การกระจายการอัตราการไหลในเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อนต่อขนาน โหลดของเครื่องกำเนิดไอน้ำ และเครื่องกำเนิดไฟฟ้าในโรงงานเป็นต้น และ

และในส่วนของการกำหนดการ เช่น กำหนดเวลาการเปลี่ยนตัวเร่งปฏิกิริยา กำหนดการฟื้นสภาพ (Regeneration) ในเครื่องปฏิกรณ์ และกำหนดเวลาการทำความสะอาดเครื่องแลกเปลี่ยนความร้อน เป็นต้น

## 2.5 องค์ประกอบในการทำออปติไมซ์

การทำออปติไมเซชั่นประกอบด้วยองค์ประกอบสำคัญ ดังต่อไปนี้

1) แบบจำลองกระบวนการ (Process Model)

2) ฟังก์ชันจุดประสงค์ (Objective Function)

3) เงื่อนไขบังคับ (Constraints)

4) ขั้นตอนวิธีการออปติไมซ์ (Optimization Algorithm)

### 2.5.1 แบบจำลองกระบวนการ

แบบจำลองกระบวนการ คือ แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่สร้างขึ้นในการเลียนแบบ (Simulate) เพื่อหาจุดที่เหมาะสมทั้งของแบบจำลอง และกระบวนการ การที่มีความเข้าใจในแบบจำลองกระบวนการ ทำให้สามารถสร้างฟังก์ชันจุดประสงค์ และกำหนดขอบเขตของข้อจำกัดได้ แบบจำลองกระบวนการจะเปลี่ยนแปลงตามตัวแปรอิสระ (ตัวแปรปรับ) ของกระบวนการซึ่งใช้เป็นเซ็ตพอยท์ (Setpoint) ในตัวควบคุม แบบจำลองกระบวนการส่วนใหญ่มักจะเทียบกับสภาวะคงตัว (Steady State) มากกว่าแบบพลวัต (Dynamic) และมักมีความสัมพันธ์แบบไม่เชิงเส้น (Darby และ White, 1988)

แบบจำลองแบ่งได้เป็น 3 ประเภท ได้แก่

1) แบบจำลองทางทฤษฎี (Theoretical หรือ White Block Model)

เป็นแบบจำลองที่อาศัยความรู้ทางด้านฟิสิกส์, เคมี (เช่น กฎของนิวตัน, สมการสมดุลมวลและพลังงาน, เทอร์โมไดนามิกส์ หรือจลนศาสตร์เคมีฯ) มาใช้ในการสร้าง และอธิบายแบบจำลอง แบบจำลองประเภทนี้จะมีความสอดคล้องกับทางทฤษฎี

2) แบบจำลองเอมไพริกัล (Empirical หรือ Black Box Model)

เป็นแบบจำลองที่สร้างขึ้นจากความสัมพันธ์ของข้อมูลเข้า และออก (Empirical Data, Operation Data, Plant Data) โดยไม่อาศัยความรู้ทางทฤษฎีมาเกี่ยวข้อง แบบจำลองเอมไพริกัลที่ได้จึงอาจจะสอดคล้องกับทางทฤษฎีหรือไม่ก็ได้ ถึงแม้แบบจำลองเอมไพริกัลนี้สร้างง่าย แต่ก็เป็นแบบจำลองที่มีความแม่นยำในช่วงจำกัด (Limited Validity) ของการปฏิบัติงาน กล่าวคือ แบบจำลองจะสมเหตุสมผลสำหรับจุดที่มีสภาพ หรือเงื่อนไขการทำงานแน่นอน (Certain Working Point) ไม่มีการเปลี่ยนกระบวนการ หรือพารามิเตอร์ของกระบวนการคงที่เป็นต้น นอกจากนี้การสร้างแบบจำลองประเภทนี้อาจทำได้ยาก ถ้าข้อมูลบางตัวไม่สามารถวัดได้ หรือข้อมูลไม่สมบูรณ์อันเนื่องจากสิ่งรบกวน ซึ่งต้องนำไปพิจารณาร่วมด้วย

3) แบบจำลองกึ่งเอมไพริกัล (Semiempirical หรือ Gray Block Model)

บางครั้งการสร้างแบบจำลองโดยอาศัยความรู้ทางทฤษฎี (Theoretical Model) เพียงอย่างเดียว ไม่สามารถให้แบบจำลองที่สมเหตุสมผล (Reasonable Model) และบ่อยครั้งที่แบบจำลองทางทฤษฎี ประกอบด้วยพารามิเตอร์ที่ไม่ทราบค่าเกิดขึ้น ถึงแม้โครงสร้างของแบบจำลองจะมาจากกฎทางฟิสิกส์ หรือเคมีก็ตาม ด้วยเหตุนี้จึงต้องอาศัยข้อมูลจากการทดลอง (Empirical Data) มาใช้ในการประมาณค่าพารามิเตอร์บางตัวที่ไม่ทราบค่าเหล่านั้น แบบจำลองที่สร้างโดยอาศัยความรู้ทางทฤษฎี และข้อมูลจากการทดลองนี้เรียกว่า แบบจำลองกึ่งเอมไพริกัล แบบจำลองนี้สามารถใช้ได้ในช่วงกว้างมากกว่าแบบจำลองเอมไพริกัลที่มีความแม่นยำในช่วงจำกัด และยังสามารถใช้ได้ในกรณีที่ตัวแปรที่วัดค่าไม่ได้ หรือตัวแปรกระบวนการเปลี่ยนแปลงเมื่อเงื่อนไขการปฏิบัติงานเปลี่ยนไป

นอกจากนี้แบบจำลองยังสามารถแบ่งได้หลายประเภท (Edgar และ Himmelblau, 1989) ได้แก่

1) แบบจำลองเชิงเส้น และไม่เชิงเส้น (Linear และ Nonlinear)

แบบจำลองจะเป็นเชิงเส้นก็ต่อเมื่อตัวแปรตาม หรืออนุพันธ์ของมันเป็นกำลังหนึ่งเท่านั้น นอกเหนือจากนี้ถือว่าเป็นแบบจำลองไม่เชิงเส้น สำหรับกระบวนการทางเคมีส่วนใหญ่ มักจะเป็นแบบจำลองแบบไม่เชิงเส้น เช่น หอกลั่น เครื่องปฏิกรณ์ ฯ

2) แบบจำลองคงตัว และไม่คงตัว (Steady State และ Unsteady State)

สภาวะคงตัว (Steady State หรือTime Invariant หรือ Static หรือStationary) หมายถึง ตัวแปรตามที่มีค่าคงที่ไม่เปลี่ยนแปลงตามเวลา ($\delta/\delta t$ =0) ขณะที่สภาวะไม่คงตัว (Unsteady State หรือNonsteady State หรือTransient หรือDynamic) หมายถึง ตัวแปรตามของกระบวนการมีการเปลี่ยนแปลงตามเวลา เช่น ในเครื่องปฏิกรณ์มีการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นตลอดเวลา

3) แบบจำลองที่มีการกระจายพารามิเตอร์ และรวมพารามิเตอร์

(Distributed และ Lump Parameter)

แบบจำลองแบบรวมพารามิเตอร์จะใช้ในระบบที่คุณสมบัติ และสภาวะของระบบสามารถพิจารณาว่ามีความเป็นเนื้อเดียว (Homogeneous) ตลอดปริมาตรที่พิจารณา เช่น ในถังกวนแบบต่อเนื่อง (CSTR) ในทางตรงข้ามแบบจำลองแบบกระจายพารามิเตอร์ จะพิจารณาให้มีความแตกต่างกันจากจุดหนึ่งไปอีกจุดหนึ่ง เช่นในปฏิกรณ์แบบท่อ (Tubular Reactor)

4) แบบจำลองที่ตัวแปรต่อเนื่อง และไม่ต่อเนื่อง

(Continuous และ Discrete variable)

ตัวแปรต่อเนื่อง หมายถึงตัวแปรที่มีหลายๆ ค่าจำนวนไม่จำกัดในช่วงเวลาหนึ่ง ขณะที่ตัวแปรไม่ต่อเนื่อง คือตัวแปรที่มีค่าต่างๆ จำนวนจำกัดในช่วงเวลาหนึ่ง บ่อยครั้งในวิศวกรรมเคมีจะพบตัวแปรไม่ต่อเนื่อง และตัวแปรต่อเนื่องเกิดขึ้นในปัญหาพร้อมๆ กัน เช่นถ้าต้องการออปติไมซ์ระบบคอมเพสเซอร์ ก่อนอื่นจะต้องเลือกจำนวนขั้น (Stage, ตัวแปรไม่ต่อเนื่อง) ที่จะใช้ในการอัด ส่วนความดันที่ออกมาจากแต่ละขั้นเป็นตัวแปรแบบต่อเนื่อง

**2.5.2 ฟังก์ชันจุดประสงค์**

ฟังก์ชันจุดประสงค์ หมายถึงสมการหรือกลุ่มของสมการ (Equations หรือModel) ที่สร้างขึ้นเพื่อใช้คำนวณ เพื่อหาค่าต่ำสุด หรือเพื่อหาค่าสูงสุด ฟังก์ชันจุดประสงค์ มีหลายรูปแบบด้วยกันตามวัตถุประสงค์ของงาน บางครั้งเรียกว่าเป็น แบบจำลองทางเศรษฐศาสตร์ (Economic Model) เช่น งานทางด้านเศรษฐศาสตร์ ฟังก์ชันจุดประสงค์ อาจจะเป็น

- มินิไมซ์ต้นทุนประจำปี
- แมคซิไมซ์กำไรสุทธิ
- แมคซิไมซ์รายได้
- มินิไมซ์เวลา

งานทางด้านการพัฒนาเทคโนโลยีทางการผลิต ฟังก์ชันจุดประสงค์ อาจเป็น

- แมคซิไมซ์อัตราการผลิต
- มินิไมซ์เวลาในการผลิต
- มินิไมซ์พลังงานที่ใช้

ฟังก์ชันจุดประสงค์ ยังแบ่งเป็น 3 ประเภท (Edgar และ Himmelblau, 1989) ได้แก่

1. เกี่ยวกับต้นทุนการดำเนินงาน (Operation cost) ในกรณีที่มีการติดตั้งอุปกรณ์เรียบร้อยอยู่แล้ว และต้องการหาเงื่อนไขที่ดีที่สุดของกระบวนการ บางครั้งเรียกว่า ปัญหาการควบคุมแบบซุปเปอร์ไวซอรี (Supervisory Control Problem) เช่น เพื่อหาอุณหภูมิ หรือความดันที่เหมาะสม

2. เกี่ยวกับการลงทุน (Capital Cost) มักจะเกี่ยวกับการออกแบบทางเครื่องกล เช่น การออกแบบขนาดอุปกรณ์ การออกแบบผังท่อ

3. เกี่ยวข้องทั้งข้อ 1 และข้อ 2 ฟังก์ชันจุดประสงค์ ประเภทนี้จะประกอบด้วย เทอมทั้งสองประเภท (เช่น ดอลลาร์ สำหรับต้นทุน และดอลลาร์ต่อปี สำหรับค่าใช้จ่ายในการปฏิบัติงาน) และอยู่ในรูปสมการที่ซับซ้อน

การเลือกฟังก์ชันจุดประสงค์ที่ถูกต้องเป็นสิ่งสำคัญ โดยต้องพิจารณาให้รอบคอบเพื่อให้การออปติไมซ์ประสบความสำเร็จ อย่างเช่น Factora, Gochenour และ Kelly (1991) ให้เหตุผลของการที่ไม่เลือกผลิตเอทิลีนสูงสุดเป็นฟังก์ชันจุดประสงค์ เนื่องจากถ้าสนใจจะผลิตให้ได้ปริมาณมากแล้ว จะลดความสำคัญของต้นทุนที่ใช้ผลิตลง จึงทำให้ต้นทุนที่ใช้สูง ซึ่งเป็นสิ่งที่ไม่ต้องการ อีกทั้งเนื่องจากข้อจำกัดของอุปกรณ์ และความต้องการผลิตภัณฑ์มีจำกัดด้วย แต่เลือกกำไรสูงสุดเป็นฟังก์ชันจุดประสงค์ เนื่องจากฟังก์ชันจุดประสงค์รูปแบบนี้มีความยืดหยุ่นเพียงพอ และสามารถใช้หาผลิตภัณฑ์เอทิลีนที่มากที่สุด ขณะที่ความต้องการของตลาดตายตัว หรือ ต้นทุนในทางเศรษฐศาสตร์ของเอทิลีนสูงก็ตาม

**2.5.3 เงื่อนไขบังคับ**

ในแต่ละขบวนการจะมีข้อจำกัดของกระบวนการอยู่ ซึ่งข้อจำกัดเหล่านี้จะเป็นตัวกำหนดขอบเขตของการดำเนินกระบวนการ (Feasible path) ขอบเขตของกระบวนการแบ่งออกเป็น

1) เงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากัน (Inequality Constraints)

เป็นสมการแสดงข้อจำกัดของการออก แบบและข้อจำกัดต่างๆ เนื่องจากการผลิต เช่น

- ข้อจำกัดของอุปกรณ์ที่ใช้
- ขีดความสามารถในการเก็บ (Storage) ผลิตภัณฑ์

วัตถุดิบ (Feedstock) เช่น

- ปริมาณที่มีจำกัด
- คุณภาพ
- ความปลอดภัย อาทิเช่น ช่วงอุณหภูมิ ความดัน หรืออัตราการไหลที่ยอมรับได้

ตัวอย่างเงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากันอื่นๆ เช่น

- เศษส่วนโมล และค่าอัตราการไหลควรมากกว่า หรือเท่ากับศูนย์
- ค่าสูงสุดของความดันของระบบ
- ค่าสูงสุดของปริมาตรของสารที่ถังปฏิกรณ์รับได้
- ค่าต่ำสุดของอัตราการผลิต หรือความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์

2) เงื่อนไขบังคับแบบเท่ากัน (Equality Constraints)

เป็นสมการที่แสดงข้อกำหนดของแบบจำลองกระบวนการ และผลิตภัณฑ์ เช่น

- ความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์
- สมดุลมวล และความร้อน
- สมการผลรวมของเศษส่วนโมล
- สมการสมดุล

**2.5.4 ขั้นตอนวิธีการออปติไมซ์**

ขั้นตอนวิธีที่ใช้สำหรับการออปติไมซ์ จะใช้แบบจำลองของกระบวนการ และฟังก์ชั่นจุดประสงค์ในการหาเซ็ตพอยท์ที่เหมาะสมของกระบวนการ รูปแบบทั่วๆไปของปัญหาการออปติไมซ์สามารถเขียนในรูปของสมการคณิตศาสตร์ได้ดังนี้

มินิไมซ์ หรือแมคซิไมซ์ $f(\bar{x})$ ,$\bar{x} \in Rn$

โดยมีเงื่อนไข

$$h_k(\bar{x}) = 0 \qquad ; k = 1,\ldots,K$$

$$g_j(\bar{x}) \geq 0 \qquad ; j = 1,\ldots,J$$

$$\bar{x}_i^{\,L} \leq \bar{x}_i \leq \bar{x}_i^{\,U} \qquad ; i = 1,\ldots,n$$

สำหรับปัญหาการหาค่าสูงสุดแทนด้วย

$$\max f(\bar{x}) = -\min\left[-f(\bar{x})\right]$$

เมื่อ $f(x)$ แทน ฟังก์ชันจุดประสงค์

$h_k(x)$ แทน เงื่อนไขบังคับแบบเท่ากัน

$g_j(x)$ แทน เงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากัน

$x$ แทน ตัวแปรอิสระ

$L$ แทน ขอบเขตล่าง

$U$ แทน ขอบเขตบน

ในการแก้สมการเพื่อหาคำตอบของการออปติไมซ์นั้น คำตอบที่ได้อาจมีเพียงคำตอบเดียว หรืออาจมีได้มากมาย ขึ้นอยู่กับจำนวนตัวแปรไม่ทราบค่า และจำนวนสมการอิสระ (Edgar และ Himmelblau, 1989) กล่าวคือ

เมื่อ $m_h$ = จำนวนสมการเงื่อนไขแบบเท่ากัน

$m_g$ = จำนวนสมการเงื่อนไขแบบไม่เท่ากัน

$p$ = จำนวนตัวแปรไม่ทราบค่า และ

$N_F = p - (m_h + m_g)$ = ระดับขั้นความเสรี (Degree of Freedom)

จากสมการข้างต้นสามารถแบ่งเป็นกรณีต่างๆ ได้ดังนี้

1) ถ้า $N_F = 0$ แล้ว (Exact Solution)

คือ จำนวนตัวแปรไม่ทราบค่า เท่ากับจำนวนสมการอิสระคำตอบในการออปติไมซ์ มีคำตอบเดียว สามารถแก้สมการได้เลยโดยไม่จำเป็นต้องอาศัยเทคนิคในการออปติไมซ์หาคำตอบ

2) ถ้า $N_F < 0$ แล้ว (Overdetermined Solution)

คือ จำนวนตัวแปรไม่ทราบค่า น้อยกว่าจำนวนสมการอิสระ ดังนั้นจึงเป็นสมการที่ไม่สามารถแก้หาคำตอบที่แน่นอนได้ นอกจากจะลดจำนวนสมการลง

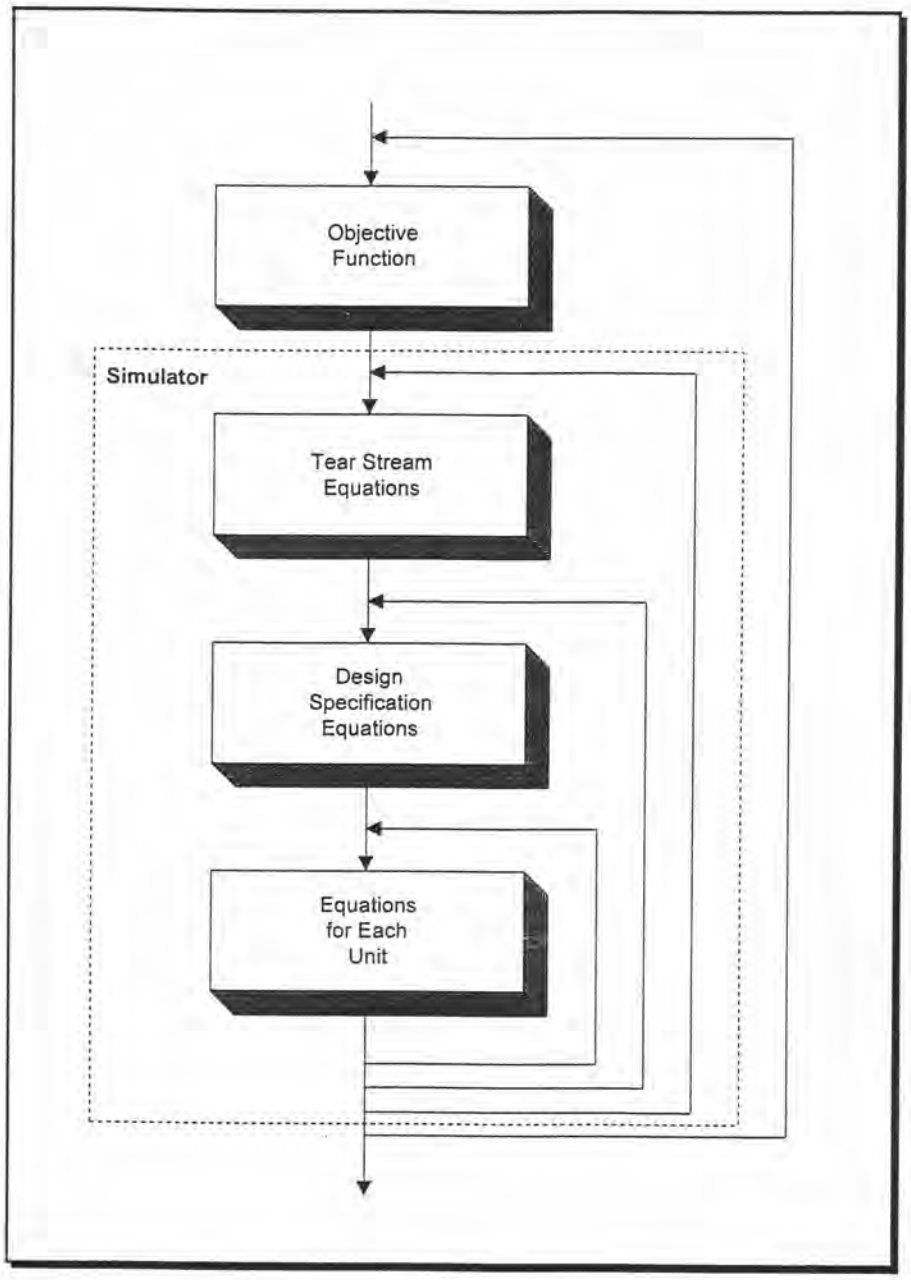
3) ถ้า $N_F > 0$ แล้ว (Underdetermined Solution)

คือ จำนวนตัวแปรไม่ทราบค่า มากกว่าจำนวนสมการอิสระ คำตอบในการออปติไมซ์จึงมีจำนวนมากมาย ซึ่งต้องใช้เทคนิคในการออปติไมซ์อื่นๆ ช่วยในการหาคำตอบที่ดีที่สุด

สำหรับเทคนิคในการออปติไมเซชั่น (Optimization Techniques) มีมากมาย ทั้งที่ใช้แก้ปัญหาแบบตัวแปรเดียว (Single variable) แบบหลายตัวแปร (Multivariable) แบบที่มีเงื่อนไขบังคับและไม่มีเงื่อนไขบังคับ (Unconstraints) ขั้นตอน และวิธีการค้นหาคำตอบวิธีต่างๆ แสดงไว้ใน Gaines และ Gaddy, 1976; Latour ,1979; Edgar และ Himmelblau, 1989 จึงขอไม่กล่าวในรายละเอียด สำหรับในงานวิจัยการทำความเย็นด้วยเอทิลีนนี้ จะใช้เทคนิคออปติไมซ์แบบควอดเดรติกแบบต่อเนื่อง (Successive Quadratic Programming, SQP) จึงขอกล่าวถึงความเป็นมาโดยย่อ

เดิมทีมีความพยายามที่จะออปติไมซ์โดยใช้ตัวเลียนแบบ (Simulator) เป็นแบล็คบ๊อกซ์ (รูปที่ 2.2) ซึ่งเป็นวิธีการที่ดำเนินไปตามทางที่เป็นไปได้ (Feasible Path) ปัญหาเงื่อนไขบังคับในการเลียนแบบ (Constrain Simulation Problem) จะถูกแก้ในแต่ละรอบคำนวณของการออปติไมซ์ และสามารถนำมาใช้ในการแก้ปัญหาการโปรแกรมไม่เชิงเส้น (Nonlinear

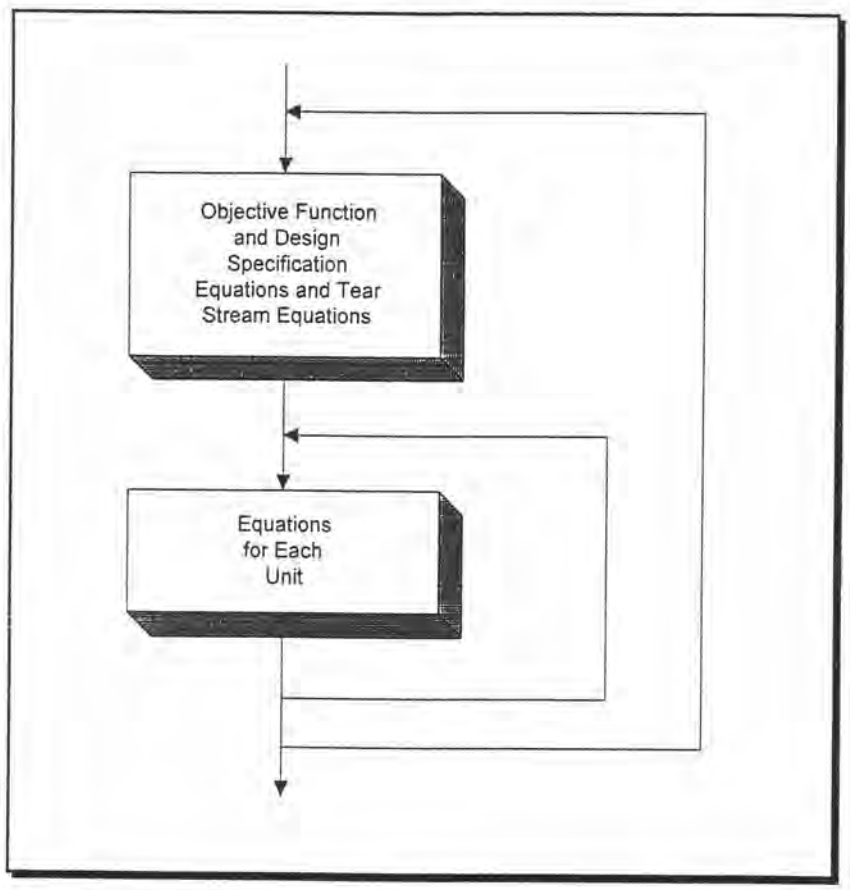
Programming Algorithm) เพื่อคำนวณหาค่าตัวแปรตัวตัดสินใจใหม่ได้ แต่ก็ใช้เวลาการหาเกรเดียนท์ของฟังก์ชันจุดประสงค์นาน เพราะปัญหาเงื่อนไขบังคับในการเลียนแบบจะต้องลู่เข้าในการคำนวนแต่ละรอบเสียก่อน ซึ่งเป็นเรื่องยุ่งยาก ด้วยเหตุนี้ทำให้วิธีการสุ่ม และวิธีการค้นหา (วิธีการ Random หรือPattern Search) อย่างเช่น วิธีการคอมเพล็กซ์ (Complex Method) ด้อยประสิทธิภาพ (Box, 1979) เนื่องจากเป็นไปได้ว่า วิธีการเหล่านี้ทำให้เกิดปัญหาการเลียนแบบแบบอินฟีสสิเบิล พาธ (Infeasible Simulation Problem) ในระหว่างการคำนวณค่าตัวแปรตัดสินใจ ทำให้การลู่เข้าล้มเหลว หรือยากขึ้น ถ้ายิ่งทำต่อไปประสิทธิภาพ และความน่าเชื่อถือจะลดลง วิธีการเหล่านี้จึงไม่เหมาะที่จะนำมาใช้ ในกรณีที่ต้องการแก้ปัญหาการออปติไมซ์ที่มีตัวแปรจำนวนมาก (Ballman และ Gaddy, 1977) เพราะใช้จำนวนการวนซ้ำ และเวลาในการเลียนแบบกระบวนการ (Simulation Time Equivalent) มากไป




**รูปที่ 2.2** การออปติไมซ์แบบแบล็คบ๊อกซ์ (Black Box Optimization)

จึงมีการพัฒนาวิธีการแก้ปัญหาการออปติไมซ์แบบไม่เชิงเส้นขึ้น เช่น การโปรแกรมแบบควอดเดรติกแบบต่อเนื่อง (Successive Quadratic Programming, SQP) ซึ่งเป็นวิธีที่สามารถใช้แก้ปัญหาการออปติไมซ์ที่ซับซ้อนได้อย่างมีประสิทธิภาพ (เช่นในงานวิจัยของ Chen และ Stadtherr, 1985; Gallier และ Kisala, 1987; Darby และ White, 1988; Factora และ Ayala, 1992; Bailey และคณะ, 1993; Wendy และคณะ, 1994; Eliceche, Petracci, Hoch และ Brignole, 1995 )

การโปรแกรมแบบควอดเดรติกแบบต่อเนื่อง ใช้หลักการประมาณฟังก์ชันจุดประสงค์ให้อยู่ในรูปควอดเดรติกฟังก์ชัน จากนั้นจึงแก้ปัญหาแบบการโปรแกรมแบบควอดเดรติก (Quadratic Programming Problem) โดยที่ฟังก์ชันจุดประสงค์จะถูกประมาณใหม่ทุกครั้งที่ได้คำตอบ และทิศทางการค้นหาคำตอบ จะไปในทางที่ฟังก์ชันจุดประสงค์มีค่าลดลง การโปรแกรมแบบควอดเดรติกแบบต่อเนื่องเป็นวิธีแบบอินฟีสสิเบิลพาธ (Infeasible Path, รูปที่ 2.3)




**รูปที่ 2.3** การออปติไมซ์แบบอินฟีสสิเบิลพาธ (Infeasible Path Optimization)

กล่าวคือ เงื่อนไขบังคับแบบเท่ากัน หรือเงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากันไม่จำเป็นต้องลู่เข้าสู่ค่าที่กำหนดไว้ในแต่ละรอบของการคำนวณ แต่จะลู่เข้าสู่ค่าที่กำหนดไว้ เมื่อฟังก์ชันจุดประสงค์ลู่เข้าสู่ค่าที่เหมาะสม ถึงแม้ปัญหาเงื่อนไขบังคับแบบเท่ากัน หรือเงื่อนไขบังคับแบบไม่เท่ากัน จะมีตัวแปรกว่าหนึ่งร้อยตัว หรือมากกว่าก็ตาม (Gallier และ Kisala, 1987) ผลจากการใช้ SQP แก้ไขปัญหาการออปติไมซ์ของ Kisala (1987) แสดงให้เห็นว่าใช้เวลาในการเลียนแบบกระบวนการน้อยและให้ผลที่รวดเร็วกว่าวิธีอื่น ส่วนรายละเอียดของเทคนิคนี้แสดงไว้ในหนังสือของ Edgar และ Himmelblau (1989)

**2.6 แพคเกจการเลียนแบบกระบวนการ กับการออปติไมซ์**

แม้ว่าการจำลองแบบกระบวนการ และการแก้ปัญหาออปติไมซ์ ไม่จำเป็นต้องอาศัยคอมพิวเตอร์ในการแก้ปัญหาเสมอไป แต่การใช้การจำลองกระบวนการในปัจจุบัน มักใช้กับกระบวนการที่มีความยุ่งยากซับซ้อน และด้วยปัญหาด้านเวลา จึงต้องอาศัยคอมพิวเตอร์สำหรับช่วยคำนวณ เมื่อคอมพิวเตอร์ได้เข้ามามีบทบาท และเป็นเครื่องมือที่ช่วยวิศวกรกระบวนการ ในช่วงแรกๆ นั้น ตัวเลียนแบบกระบวนการ (Simulator) เป็นโปรแกรมที่ใช้สร้างแบบจำลอง สำหรับกระบวนการ หรืองานที่เฉพาะเจาะจง ความแพร่หลายของการใช้งานก็ยังคงอยู่ในวงจำกัด (Gallier และ Kisala, 1987)

เมื่อมีการพัฒนาคอมพิวเตอร์ให้มีสมรรถนะด้านต่างๆให้ดีขึ้นทั้งด้านฮารด์แวร์ (Hardware) และซอฟต์แวร์ (Software) โดยเฉพาะหน่วยความจำที่มีขนาดใหญ่ขึ้น การแสดงผลเป็นรูป และความรวดเร็วในการคำนวณ ตลอดจนราคาที่ถูกลง ซึ่งส่วนธุรกิจ และอุตสาหกรรม สามารถซื้อหามาได้ ประกอบกับบริษัทผู้ผลิตโปรแกรมคอมพิวเตอร์ต่างๆ หันมาให้ความสนใจกับการพัฒนาภาษาเฉพาะการจำลองแบบปัญหาสำหรับใช้กับคอมพิวเตอร์ และประกอบกับความก้าวหน้าด้านคอมพิวเตอร์ที่เจริญรุดหน้าไปอย่างรวดเร็ว ทำให้ปัจจุบันการจำลองแบบปัญหา หรือการจำลองกระบวนการด้วยคอมพิวเตอร์เป็นวิธีที่นิยมที่สุด (Gallier และ Kisala, 1987; Dimian, 1994 และ Glasscock และ Hale, 1994 ) ซอฟต์แวร์ หรือ ตัวเลียนแบบกระบวนการ (Simulator Packages) ที่ใช้ในการเลียนแบบกระบวนการมีหลายประเภท ทั้งที่ทำการเลียนแบบที่สภาวะคงตัว (Steady State) การเลียนแบบแบบพลวัต (Dynamic) การรวบรวมพลังงาน (Energy Integration) การคำนวณการไหลแบบพลวัต (Computational Fluid Dynamics) และระบบผู้เชี่ยวชาญ (Expert systems) อีกทั้งตัวเลียนแบบกระบวนการที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองแต่ละประเภทก็มีให้เลือกมากมาย และมีความยืดหยุ่นสูง สามารถประยุกต์ใช้กับอุตสาหกรรมหลายประเภท ในประเทศอุตสาหกรรมการจำลองกระบวนการเป็นเครื่องมือที่สำคัญในการศึกษา ออกแบบ และยังใช้เป็นเครื่องมือสำหรับการวิเคราะห์ และวางแผนกระบวนการผลิตรูปแบบต่างๆ โดยอาศัยตัวเลียนแบบกระบวนต่างๆ ปัจจัยสำคัญดังกล่าวสนับสนุนให้เกิดความสะดวก และรวดเร็วในการจำลองกระบวนการ และการออปติไมซ์ (Gallier และ Kisala, 1987)

แพคเกจการเลียนแบบกระบวนการที่นิยมใช้ในการจำลองกระบวนการต่างๆ แบ่งได้เป็น 2 แบบ (Factora และ Ayala, 1976; Chen และ Stadtherr, 1985; Biegler และ Hughes, 1982; Bailey, 1991; Gallun, Luecke, Scott และ Morshedi, 1992 ) คือ

1. แพคเกจการเลียนแบบกระบวนการแบบปิด หรือ แบบเรียงลำดับ
(Closed Form หรือ Sequential Modular)

- ใช้สมการแบบปิด
- ส่งผ่านข้อมูลทีละบล๊อก (Block) หรือเรียงลำดับไป
- ใช้กันแพร่หลายในอุตสาหกรรม น่าเชื่อถือ และสะดวกในการใช้งาน
- เช่น AspenPlus ProII Hysim Hysis BPS BioPro ฯลฯ

2. แพคเกจการเลียนแบบกระบวนการแบบเปิด หรือ แบบพร้อมกัน (Opened Form หรือ Simultaneous หรือ Equation Oriented)

- ใช้สมการแบบเปิด
- แก้สมการพร้อมกันหมด
- เป็นตัวเลียนแบบ (Simulator) ที่มีความยืดหยุ่นสูง ต้องใช้บุคลากร ที่มีความเชี่ยวชาญเป็นพิเศษ จึงไม่ค่อยใช้กันในอุตสาหกรรม
- เช่น Speedup Massbal SIMMOD ASCEND FLOWSIM OUASILIN ฯลฯ

ตัวอย่างแพคเกจในการเลียนแบบกระบวนการต่างๆ ที่ถูกนำมาใช้ในการแก้ปัญหาออปติไมซ์ อาทิเช่น

Gaines และ Gaddy (1976) ใช้ PROPS เป็นแพคเกจในการเลียนแบบกระบวนการ และออปติไมซ์กระบวนการเกิดพอลิเมอร์ของแก๊สโซลีน โดยใช้เทคนิคลู่เข้าหาคำตอบต่างๆ ได้แก่ วิธีการคอมเพล็กซ์ วิธีการค้นหาแบบแพทเทิร์น และวิธีการค้นหาแบบอะแดพทีฟแลนดอม (Adaptive Random Search Method) พบว่า วิธีการค้นหาแบบอะแดพทีฟแลนดอม สามารถหาจุดที่เหมาะสมได้ ขณะที่วิธีการอื่น ไม่สามารถหาได้ เพราะไม่เป็นไปตามเงื่อนไขบังคับต่างๆ โดยสามารถเพิ่มเงินคืนจากการลงทุน ได้มากที่สุด 14.93%

Chen และ Stadtherr (1985) ศึกษาการสมรรถนะในการแก้ปัญหาการจำลองกระบวนการและการออปติไมซ์ ของแพคเกจการเลียนแบบกระบวนการแบบเปิดโดยใช้ SIMMOD โดยศึกษากับปัญหาการออปติไมซ์กระบวนการต่างๆ 4 กระบวนการ ได้แก่ 1) การออปติไมซ์ถังแฟลช 2 ถัง 2) การออปติไมซ์ถังแฟลช 3 ถัง 3) การออปติไมซ์กระบวนการการทำปฏิกิริยาพอลิเมอร์แก๊สโซลีน และ 4) การออปติไมซ์กระบวนการสังเคราะห์แอมโมเนีย พบว่า โปรแกรม SIMMOD สามารถแก้ปัญหาการออปติไมซ์ได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยในการแก้ปัญหาออปติไมซ์ใช้การคำนวณเพียง 4 ถึง 20 ครั้ง โดยเฉพาะอย่างยิ่ง เวลาที่ใช้ในการคำนวณ แต่ละปัญหาน้อยมาก นอกจากนี้งานวิจัยยังสาธิต ความเป็นไปได้ ของการพัฒนาการแก้ปัญหาออปติไมซ์ กับการใช้เครื่องมือ หรือซอฟต์แวร์นี้ในการช่วยผู้ใช้ ที่ไม่มีความรู้ หรือมีความรู้น้อยเกี่ยวกับเทคนิค และรายละเอียดการออปติไมซ์ด้วย

Bailey และ คณะ (1993) ใช้ MINOS ในการออปติไมซ์กระบวนการกลั่นแยกแก๊สไฮโดรเจน ของโรงงาน Sonoco ประเทศแคนาดา โดยจะได้กำไรเพิ่มขึ้น 3.6% หรือ 8,308 ดอลลาร์ต่อวัน

Stephenson และ Shewchuk (1986) แก้ปัญหาการปรับให้สอดคล้องของของข้อมูลของกระบวนการเยื่อกระดาษ และการทำความสะอาดเยื่อกระดาษ โดยใช้โปรแกรม Massbal ซึ่งได้แบบจำลองที่ใกล้เคียงความจริงมาก

Gallier และ Kisala (1987) ใช้ AspenPlus ในการสร้างแบบจำลอง และออปติไมซ์กระบวนการสังเคราะห์แอมโมเนีย เพื่อเพิ่มปริมาณแอมโมเนียจากกระบวนการให้มากที่สุด โดยสามารถเพิ่มปริมาณการผลิตแอมโมเนียมากขึ้นอีก 12%

Pimenta และ Feyo de Azevedo (1990) ศึกษาการออกแบบทางเทอร์โมไดนามิกส์ ในการวิเคราะห์รูปแบบทางเลือก เพื่อให้สามารถใช้หม้อต้มระเหยน้ำตาล ได้อย่างมีประสิทธิภาพ โดยใช้โปรแกรม MULTEVA ในการเลียนแบบกระบวนการของหม้อต้มระเหยน้ำตาล พบว่าตัวเลียนแบบสามารถประมาณ สัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อนจากผลการทดลองได้ และให้ผลการเลียนแบบที่แม่นยำ มีประสิทธิภาพมาก และยังเป็นโปรแกรมที่มีความยืดหยุ่น มีประโยชน์ต่อผู้ใช้ อีกทั้งมีราคาไม่แพง หากจะนำมาใช้ออกแบบ และดำเนินงานเกี่ยวกับกระบวนการทางเคมี เป็นต้น

แพคเกจต่างๆ ที่ใช้ในการสร้างแบบจำลอง และการออปติไมซ์ ยังสามารถดูได้ในหนังสือของ Edgar และ Himmelblau (1989)

## 2.7 สรุป

ในบทนี้ได้กล่าวถึง การเลียนแบบกระบวนการ การปรับให้สอดคล้องของข้อมูล และการออปติไมซ์ เพื่อให้มีความรู้ และความเข้าใจเบื้องต้นซึ่งต่อไปจะนำไปประยุกต์ใช้กับระบบการทำความเย็นด้วยเอทิลีน ในการสร้างแบบจำลองเพื่อเลียนแบบกระบวนการ การปรับให้สอดคล้องของข้อมูล และการออปติไมซ์ระบบทำความเย็นด้วยเอทิลีนต่อไป บทถัดไปจะเป็นการอธิบายกระบวนการผลิตเอทิลีน และระบบทำความเย็นด้วยเอทิลีนของโรงงานไทยโอเลฟินส์