

การเปรียบเทียบฟังก์ชันและแพ็คเกจของโปรแกรม R สำหรับวิเคราะห์
กระบวนการพื้นผิวตอบสนอง กรณีตัวแปรตาม 2 ตัวแปร
**COMPARATIVE ANALYSIS OF THE FUNCTION AND PACKAGES IN R
FOR MULTIPLE RESPONSES IN CASE OF TWO RESPONSES**

ศรัญญา ทองสุข
Saranya Thongsook

Faculty of Science and Technology, Pibulsongkram Rajabhat University
corresponding author e-mail: s_thongsook@hotmail.com

บทคัดย่อ

การหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง (global optimization) เป็นขั้นตอนหนึ่งที่สำคัญสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนอง โดยส่วนใหญ่แล้วในขั้นตอนดังกล่าวนิยมใช้โปรแกรมสำเร็จรูปทางสถิติ (Statistical Package Program) เช่น statistical analysis system (SAS), statistical package for the social science (SPSS), MINITAB, DESIGN EXPERT, JMP และ R ฯลฯ แต่อย่างไรก็ตามโปรแกรมสำเร็จรูปทางสถิติส่วนมากจะมีข้อจำกัดในด้านลิขสิทธิ์ อาทิ Design Expert, Minitab, SAS, SPSS และอื่น ๆ แต่ในทางตรงกันข้ามโปรแกรม R เป็นฟรีแวร์ที่ผู้ใช้สามารถเข้าถึงได้โดยไม่ต้องเสียค่าใช้จ่ายใด ๆ อีกทั้งในโปรแกรม R ยังมีฟังก์ชันและแพ็คเกจหลายตัวสำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงอีกด้วย แต่อย่างไรก็ตามผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรม R ควรได้รับการตรวจสอบก่อนใช้สรุปผลเสมอ ถึงแม้ว่าโปรแกรม R จะมีฟังก์ชันและแพ็คเกจสำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับงานในด้านต่าง ๆ หลายตัว แต่ยังไม่มียานวิจัยที่ทำการศึกษารเปรียบเทียบฟังก์ชันหรือแพ็คเกจของโปรแกรม R สำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงในกระบวนการพื้นผิวตอบสนองสำหรับกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว ดังนั้นในงานวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยต้องการวิเคราะห์เปรียบเทียบฟังก์ชัน "optim" และแพ็คเกจ "rgenoud" และ "DEoptim" ในโปรแกรม R เวอร์ชัน 3.2.3 สำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวโดยดูจากผลลัพธ์ของค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ใช้สำหรับการหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงของแต่ละฟังก์ชันและแพ็คเกจ จากผลการเปรียบเทียบที่ได้จากงานวิจัยครั้งนี้สรุปได้ว่า ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Nelder and Mead เป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง สำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว โดยพิจารณาจากค่าสูงสุดของ overall desirability ที่มากที่สุด

คำสำคัญ: ฟังก์ชัน desirability โปรแกรม R ค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง

Abstract

Global Optimization is an important part in response surface methodology (RSM). Statistical package program is mostly used to find the global optimization such

as statistical analysis system (SAS), statistical package for the social science (SPSS), MINITAB, DESIGN EXPERT, JMP, R and so forth. However, most softwares were restricted as they were a licensed software for example Design Expert, Minitab, SAS, SPSS and so forth. On the other hand, R is a free software that also includes many functions and packages to find the global optimization. However, its results should be carefully applied. Moreover, the application of R for the global optimization in case of multiple responses in RSM has never been investigated. Therefore, the purpose of this research is to analytical compare the function "optim", the package "rgenoud" and the package "DEoptim" in R program version 3.2.3 for the global optimization in case of multiple responses in RSM by using the maximum result of overall desirability obtained from the function and the packages. The result of this research concludes that the function "optim" by using Nelder and Mead method is an appropriate method to find the global optimization in case of multiple responses in RSM by consideration the maximum result of overall desirability.

Keywords: desirability function, R program, global optimization.

บทนำ

กระบวนการพื้นผิวตอบสนอง (response surface methodology; RSM) เป็นวิธีการทางคณิตศาสตร์และสถิติในการหาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรอิสระต่าง ๆ และตัวแปรตามหรือเรียกอีกอย่างว่าผลตอบสนองเพื่อประโยชน์ในการสร้างสมการพยากรณ์ และเพื่อหาค่าที่เหมาะสมสำหรับตัวแปรอิสระที่ทำให้ได้ค่าสูงสุดหรือต่ำสุดของตัวแปรตาม (ผลตอบสนอง) ปัจจุบันมีการประยุกต์ใช้กระบวนการพื้นผิวตอบสนองสำหรับกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวแปรอย่างแพร่หลายในหลาย ๆ วงการ ทั้งทางด้านวิทยาศาสตร์ วิศวกรรมศาสตร์และอุตสาหกรรม ฯลฯ เช่น สูตรสำหรับการผลิตอาหารจะขึ้นอยู่กับรสชาติที่ลูกค้าต้องการและประโยชน์ต่อสุขภาพ กระบวนการการผลิตในโรงงานอุตสาหกรรมจะขึ้นอยู่กับคุณภาพของสินค้าและต้นทุนการผลิต เป็นต้น สำหรับรายละเอียดเพิ่มเติมเกี่ยวกับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองสำหรับกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวแปรสามารถหาเพิ่มเติมได้ใน (Myers et al., 2009; Lawson, 2015)

การหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง (global optimum point) เป็นขั้นตอนหนึ่งที่สำคัญสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนอง โดยส่วนใหญ่แล้วในขั้นตอนดังกล่าวนิยมใช้โปรแกรมสำเร็จรูปทางสถิติ (statistical package program) มาช่วยในการวิเคราะห์เพื่อความรวดเร็วและลดความผิดพลาดคลาดเคลื่อน ปัจจุบันมีโปรแกรมสำเร็จรูปทางสถิติที่ถูกพัฒนาขึ้นมากมาย เช่น statistical analysis system (SAS), statistical package for the social science (SPSS), MINITAB, DESIGN EXPERT, JMP และ R ฯลฯ แต่อย่างไรก็ตามโปรแกรมสำเร็จรูปทางสถิติส่วนมากจะมีข้อจำกัดในด้านลิขสิทธิ์ เช่น Design Expert, Minitab, SAS, SPSS และอื่น ๆ แต่ในทางตรงกันข้ามโปรแกรม R เป็นฟรีแวร์ที่ผู้ใช้สามารถเข้าถึงได้โดยไม่ต้องเสียค่าใช้จ่ายใด ๆ แต่อย่างไรก็ตามผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรม R ควรได้รับการตรวจสอบก่อนใช้สรุปผลเสมอเนื่องจากโปรแกรม R เปิดโอกาสให้บุคคลทั่วไปสามารถเข้าไปแก้ไข, ปรับปรุงหรือเพิ่มเติมโปรแกรมหรือแพ็คเกจสำหรับการคำนวณต่าง ๆ ได้โดยไม่ยากนักด้วยเหตุผลที่เป็น

ฟรีแวร์ ดังนั้นในบางครั้งจึงทำให้ความน่าเชื่อถือของผลลัพธ์ที่ได้อาจจะน้อยกว่าโปรแกรมที่มีลิขสิทธิ์อื่น ๆ อีกทั้งยังไม่มียานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับการประยุกต์ใช้โปรแกรม R กับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองสำหรับกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวมากนัก

ฟังก์ชันที่ถูกนำมาใช้สำหรับการหาค่าที่เหมาะสมมีหลายฟังก์ชัน เช่น ฟังก์ชันระยะทาง ฟังก์ชันการสูญเสียกำลังสอง และฟังก์ชัน *desirability* แต่อย่างไรก็ตามฟังก์ชันที่ได้ได้รับความนิยมมากที่สุด คือ ฟังก์ชัน *desirability* ของ Derringer & Suich, (1980) การหาฟังก์ชัน *desirability* ทำได้โดยการแปลงฟังก์ชันของตัวแปรตามแต่ละตัวให้อยู่ในรูปของฟังก์ชัน *desirability* จากนั้นหาค่าเฉลี่ยเรขาคณิตของฟังก์ชัน *desirability* ของตัวแปรตามแต่ละตัวซึ่งถูกเรียกว่าค่า *overall desirability* จากนั้นการเลือกค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงได้มาจากค่า *overall desirability* ที่สูงสุด

โปรแกรม R มีฟังก์ชันและแพ็คเกจสำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมสำหรับงานในด้านต่าง ๆ หลายตัว อาทิ ฟังก์ชัน “*optim*”, “*nlm*”, “*optimize*” และแพ็คเกจที่ใช้สำหรับหาค่าที่เหมาะสม ได้แก่ “*galts*”, “*mcga*”, “*rgenoud*”, “*genalg*”, “*DEoptim*” แต่อย่างไรก็ตามจากการทบทวนงานวิจัยในอดีตที่ผ่านมาพบว่า มียานวิจัยของ Kuhn (2015) เท่านั้นที่เลือกใช้ฟังก์ชัน “*optim*” ร่วมกับฟังก์ชัน “*desirability*” เพื่อใช้หาค่าที่เหมาะสมสำหรับใช้ในกระบวนการตัดสินใจตอบสนองสำหรับกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว ดังนั้นในงานวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยต้องการวิเคราะห์เปรียบเทียบฟังก์ชัน “*optim*” และแพ็คเกจ “*rgenoud*” และ “*DEoptim*” สำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว ร่วมกับ ฟังก์ชัน “*desirability*” ของ Kuhn (2015) สำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวโดยดูจากผลลัพธ์ของค่าสูงสุดของ *overall desirability* ที่ใช้สำหรับการหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงของแต่ละฟังก์ชันและแพ็คเกจ เพื่อเป็นประโยชน์สำหรับนักวิจัยในสาขาต่าง ๆ ในการตัดสินใจเลือกใช้ฟังก์ชันหรือแพ็คเกจในโปรแกรม R สำหรับการหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวต่อไป และเพื่อใช้เป็นข้อมูลสำหรับการพัฒนาและปรับปรุงฟังก์ชันหรือแพ็คเกจของโปรแกรมที่จะใช้สำหรับการหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงสำหรับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวต่อไป นอกจากนี้แล้วผลลัพธ์ของค่าสูงสุดของ *overall desirability* ที่ได้จากโปรแกรม R จะถูกนำมาเปรียบเทียบกับค่าสูงสุดของ *overall desirability* ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert (Trial version) เพื่อความน่าเชื่อถืออีกด้วย

วิธีดำเนินการวิจัย

1. Desirability function approach

มีฟังก์ชันหลายฟังก์ชันที่ถูกนำมาใช้สำหรับการหาค่าที่เหมาะสม อาทิ ฟังก์ชันระยะทางของ Khuri & Conlon (1981) ฟังก์ชันการสูญเสียกำลังสองของ Vining (1998) และฟังก์ชัน *desirability* ของ Harrington (1965), Derringer & Suich (1980) และ Del Castillo et al. (1996) เป็นต้น แต่อย่างไรก็ตาม Francisco et al. (2004) กล่าวว่าฟังก์ชัน *desirability* เป็นวิธีที่ง่ายต่อความเข้าใจและการนำมาใช้ อีกทั้งยังเป็นวิธีที่ถูกใช้หาค่าที่เหมาะสมในโปรแกรมคอมพิวเตอร์หลาย ๆ โปรแกรม

ฟังก์ชัน *desirability* ของ Derringer & Suich (1980) (Akteke-Ozturk, 2010) เป็นฟังก์ชันที่ได้รับความนิยมมากที่สุดสำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการตัดสินใจตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวแปร การหาฟังก์ชัน *desirability* ทำได้โดยการแปลงฟังก์ชันของตัวแปรตาม

แต่ละตัวให้อยู่ในรูปของฟังก์ชัน **desirability** จากนั้นก็หาค่าเฉลี่ยเรขาคณิตของฟังก์ชัน **desirability** ของตัวแปรตามแต่ละตัวซึ่งถูกเรียกว่าค่า **overall desirability** ซึ่งรูปแบบของฟังก์ชัน **desirability** สำหรับใช้หาค่าสูงสุดและค่าต่ำสุดของตัวแปรตามแต่ละตัวแสดงไว้ที่ สมการที่ (1) และ สมการที่ (2) ตามลำดับ

$$d_i = \begin{cases} 1 & \text{if } \hat{y}_i < T_i \\ \left(\frac{U_i - \hat{y}_i}{U_i - T_i}\right)^\omega & \text{if } T_i \leq \hat{y}_i \leq U_i \\ 0 & \text{if } \hat{y}_i > U_i \end{cases} \dots\dots\dots(1)$$

$$d_i = \begin{cases} 0 & \text{if } \hat{y}_i < L_i \\ \left(\frac{\hat{y}_i - L_i}{T_i - L_i}\right)^\omega & \text{if } L_i \leq \hat{y}_i \leq T_i \\ 1 & \text{if } \hat{y}_i > T_i \end{cases} \dots\dots\dots(2)$$

โดยที่ L_i คือ ขีดจำกัดล่าง U_i คือ ขีดจำกัดบน, T_i คือค่าเป้าหมายของตัวแปรตามที่ i และ ω คือ ค่าน้ำหนักของฟังก์ชันและสมการที่ใช้หาค่า **overall desirability** แสดงไว้ที่สมการที่ (3)

$$D = (d_1^{r_1} \cdot d_2^{r_2} \cdot \dots \cdot d_m^{r_m})^{1/(r_1+r_2+\dots+r_m)} \dots\dots\dots(3)$$

โดยที่ d_i คือค่า **desirability** ของตัวแปรตามแต่ละตัว และ r_i คือค่าน้ำหนักหรือค่าความสำคัญที่ให้กับตัวแปรตามแต่ละตัว

2. ฟังก์ชันและแพ็คเกจสำหรับหาค่าที่เหมาะสมในโปรแกรม R

งานวิจัยของ Scrucca (2013) ได้สรุปฟังก์ชันและแพ็คเกจในโปรแกรม R ที่ถูกใช้สำหรับหาที่เหมาะสมไว้ดังนี้ ฟังก์ชัน "optim", "nlm", "optimize" และแพ็คเกจที่ใช้สำหรับหาค่าที่เหมาะสม ได้แก่ "gals", "mcga", "rgenoud", "genalg", "DEoptim" ซึ่งฟังก์ชันและแพ็คเกจดังกล่าวส่วนใหญ่แล้วยังไม่เคยถูกใช้หาค่าที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวแปรยกเว้นฟังก์ชัน "optim" ซึ่งถูกใช้หาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง สำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัวแปรโดย Kuhn (2015) สำหรับรายละเอียดเพิ่มเติมของแต่ละฟังก์ชันและแพ็คเกจสามารถอ่านเพิ่มเติมได้ที่ Mullen et al. (2011), Mebane et al. (2011) และ Scrucca (2013) คู่มือฟังก์ชันและแพ็คเกจสำหรับโปรแกรม R

สำหรับงานวิจัยในครั้งนี้ผู้วิจัยเลือกใช้ฟังก์ชัน "optim" และแพ็คเกจ "rgenoud", "DEoptim" สำหรับการวิจัยครั้งนี้เนื่องจากฟังก์ชันและแพ็คเกจดังกล่าวเหมาะสมสำหรับข้อมูลที่เป็นจำนวนจริง ซึ่งเป็นข้อมูลที่ได้จากการทดลองในงานวิจัยครั้งนี้

3. วิธีดำเนินการวิจัย

ผู้วิจัยเลือกใช้แผนการทดลอง 2 แบบ ซึ่งเป็นแผนการทดลองที่เหมาะสมและนิยมใช้สำหรับการวิเคราะห์กระบวนการพื้นผิวตอบสนองสำหรับสมการกำลังสอง ซึ่งได้แก่ central composite design (CCD) และ near-optimal D small exact response surface designs (GA) ซึ่งเป็นแผนการทดลองที่สร้างขึ้นโดย Borkowski (2003) และสำหรับการทดลองครั้งนี้ผู้วิจัยเลือกใช้ตัวอย่างขนาด 15 สำหรับแผนการทดลอง CCD และสำหรับแผนการทดลอง GA จะใช้ตัวอย่างขนาด 14 โดยแทนสัญลักษณ์เป็น GA14 และตัวอย่างขนาด 10 โดยแทนสัญลักษณ์เป็น GA10 โดยแผนการ

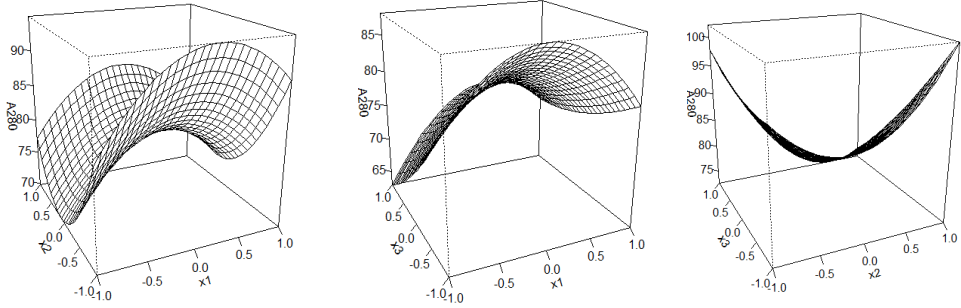
ทดลองดังกล่าวข้างต้นจะถูกนำไปใช้ในการทดลองศึกษาการใช้ถ่านกัมมันต์ (Granular Activated Carbon) ในการดูดซับน้ำตาลที่ปนเปื้อนในสารละลายโปรตีนสกัดจากกากรำสัคน้ำมัน ซึ่งเป็นการทดลองที่ทำขึ้นมาเพื่อศึกษาสำหรับงานวิจัยครั้งนี้ โดยการทดลองดังกล่าวจะประกอบด้วยตัวแปรอิสระ 3 ตัว ได้แก่ พีเอช (pH) ของสารละลายโปรตีน (X_1), เวลา (X_2) และปริมาณถ่านกัมมันต์ (X_3) โดยรูปแบบสมการกำลังสองสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองของการทดลองนี้แสดงไว้ในสมการที่ (4)

$$\hat{y}_k(x) = \beta_0 + \sum_{i=1}^3 \beta_i x_i + \sum_{i < j}^3 \beta_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^3 \beta_{ii} x_i^2 \dots\dots\dots(4)$$

- โดยที่
- $\hat{y}_1(x)$ = ปริมาณโปรตีนที่สกัดได้
 - $\hat{y}_2(x)$ = ปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์
 - β_0 = ค่าคงที่
 - β_i = ค่าสัมประสิทธิ์ของพีเอช (pH) ของสารละลายโปรตีน เวลาและปริมาณถ่าน กัมมันต์ ตามลำดับ
 - x_i = พีเอช (pH) ของสารละลายโปรตีน เวลาและปริมาณถ่านกัมมันต์ ตามลำดับ

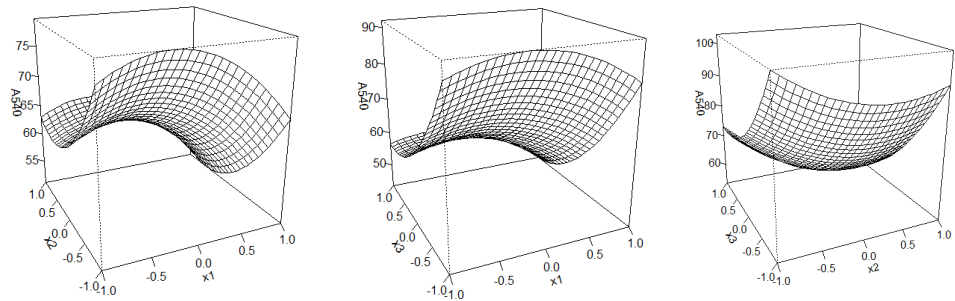
หลังจากทำการทดลองดังกล่าวแล้ว ผู้วิจัยได้นำข้อมูลของค่าปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280) และปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) พีเอช (pH) ของสารละลายโปรตีน (X_1) เวลา (X_2) และปริมาณถ่านกัมมันต์ (X_3) มาวิเคราะห์ข้อมูลใน R และ DESIGN EXPERT (Trial version) ซึ่งจากการวิเคราะห์ข้อมูลทำให้ได้สมการพยากรณ์สำหรับค่าปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280), และสมการพยากรณ์สำหรับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) ซึ่งเมื่อนำสมการพยากรณ์ของทั้ง 2 ตัวแปร สำหรับแผนการทดลอง CCD, GA14 และ GA10 มาสร้างกราฟจะได้รูปดังแสดงไว้ใน ภาพที่ 1-6 ตามลำดับ

เมื่อได้สมการพยากรณ์ของตัวแปรตามทั้งสอง ((A280), (A540)) ตัวแล้ว จากนั้นผู้วิจัยจะใช้โปรแกรม R เพื่อคำนวณหา desirability สำหรับค่าสูงสุดสำหรับปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280) โดยใช้สมการที่ (1) และคำนวณหา desirability สำหรับค่าต่ำสุดสำหรับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) โดยใช้สมการที่ (2) และใช้สมการที่ (3) เพื่อคำนวณหาค่า overall desirability ต่อจากนั้นผู้วิจัยจะใช้ฟังก์ชันหรือแพ็คเกจที่เลือกไว้ในหัวข้อ 2.2) เพื่อหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง โดยดูจากค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากฟังก์ชันและแพ็คเกจที่เลือกไว้ผู้วิจัยได้กำหนดขนาดของประชากร (N) ที่จะถูกใช้ในฟังก์ชันและแพ็คเกจต่าง ๆ ไว้เท่ากับ 8, 27, 125 และ 1,000 สำหรับการทดลองครั้งนี้ ซึ่งผู้วิจัยคาดว่า จะเหมาะสมสำหรับเป็นค่าขนาดของประชากรที่ควรจะมีค่าสูง กลาง และต่ำ



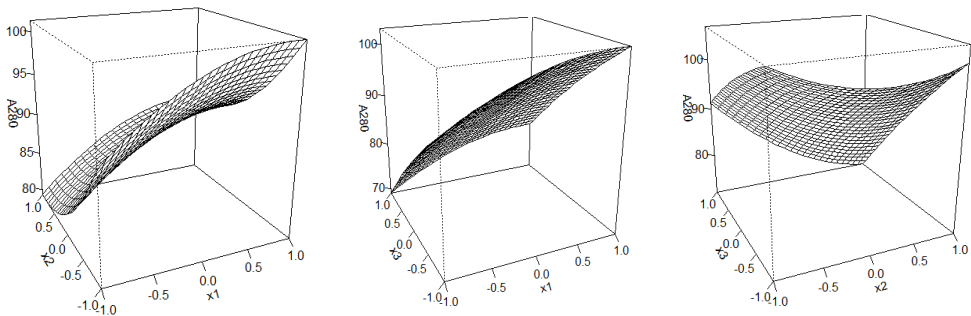
ภาพที่ 1 สมการพยากรณ์สำหรับค่าปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280) สำหรับ CCD

$$\hat{y} = 80.3 + 2.14x_1 - 3.90x_2 - 5.98x_3 - 0.93x_1x_2 - 7.89x_2x_3 + 2.73x_1x_3 - 8.16x_1^2 + 10.16x_2^2 + 1.56x_3^2$$



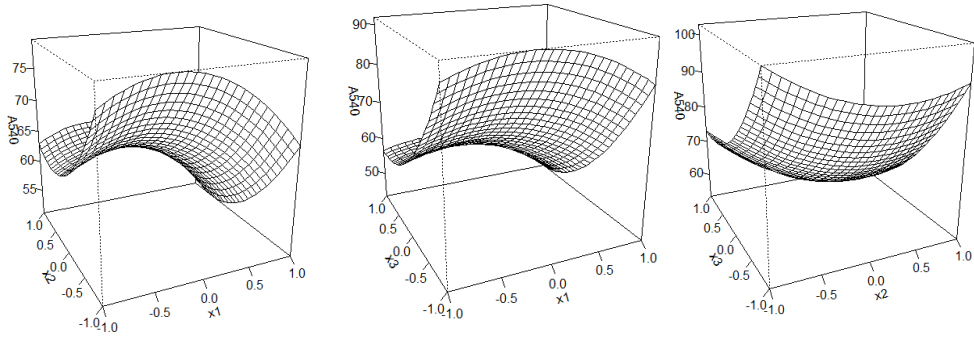
ภาพที่ 2 สมการพยากรณ์สำหรับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) สำหรับ CCD

$$\hat{y} = 64.92 - 4.88x_1 - 7.21x_2 - 17.29x_3 - 0.59x_1x_2 - 2.64x_2x_3 - 1.74x_1x_3 - 6.88x_1^2 + 6.62x_2^2 + 9.09x_3^2$$



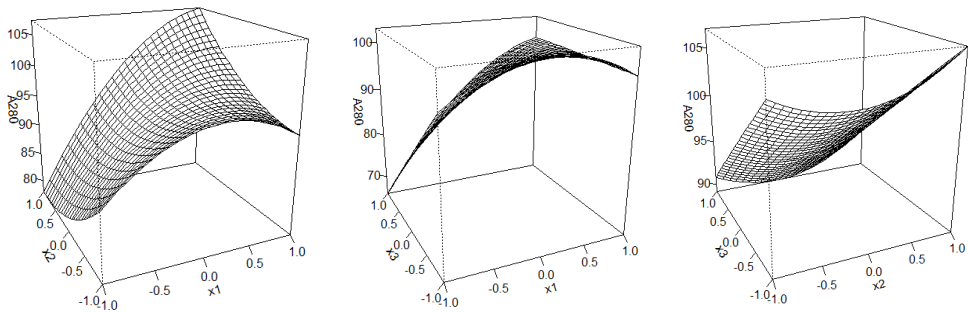
ภาพที่ 3 สมการพยากรณ์สำหรับค่าปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280) สำหรับ GA14

$$\hat{y} = 90.34 + 4.94x_1 - 5.64x_2 - 11.59x_3 + 0.18x_1x_2 - 4.08x_2x_3 + 0.05x_1x_3 - 2.64x_1^2 + 3.67x_2^2 - 1.28x_3^2$$



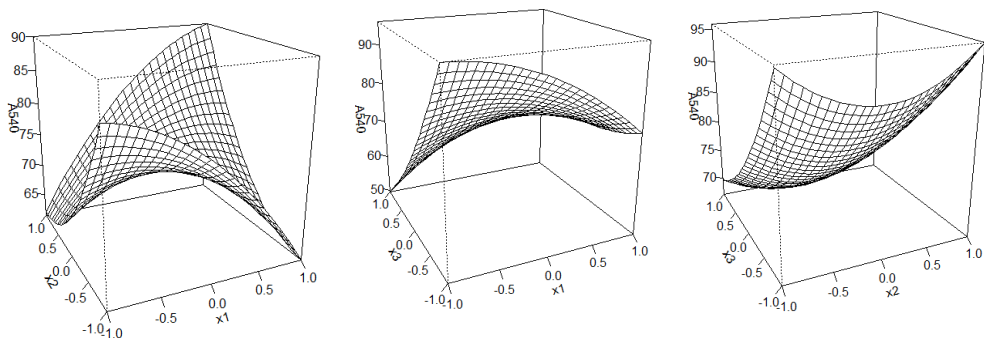
ภาพที่ 4 สมการพยากรณ์สำหรับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) สำหรับ GA14

$$\hat{y} = 69.89 - 0.87x_1 - 5.63x_2 - 18.98x_3 + 0.36x_1x_2 - 3.58x_2x_3 - 0.43x_1x_3 - 3.37x_1^2 + 2.73x_2^2 + 5.96x_3^2$$



ภาพที่ 5 สมการพยากรณ์สำหรับค่าปริมาณโปรตีนที่สกัดได้ (A280) สำหรับ GA10

$$\hat{y} = 95.47 + 7.93x_1 + 0.74x_2 - 7.42x_3 + 6.04x_1x_2 + 0.12x_2x_3 + 7.67x_1x_3 - 6.04x_1^2 + 2.94x_2^2 - 0.097x_3^2$$

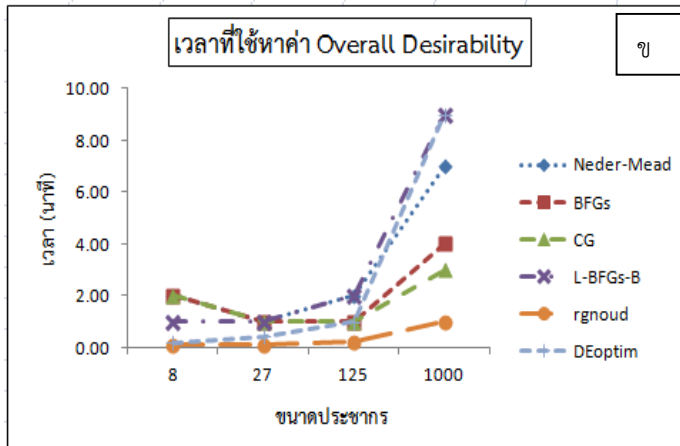
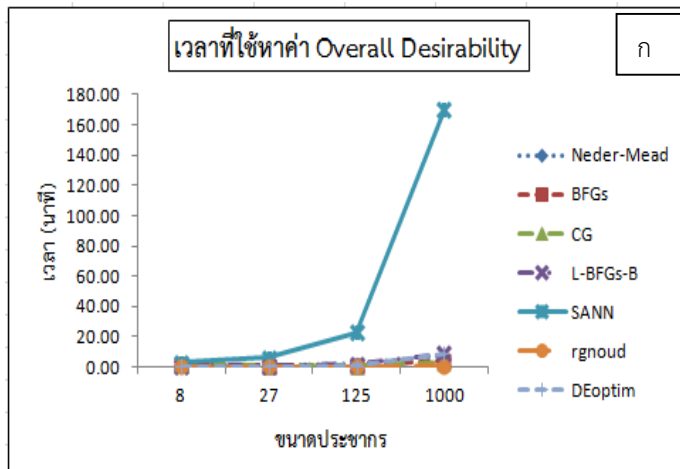


ภาพที่ 6 สมการพยากรณ์สำหรับปริมาณน้ำตาลรีดิวซ์ (A540) สำหรับ GA10

$$\hat{y} = 74.30 - 0.038x_1 + 1.18x_2 - 11.74x_3 + 12.97x_1x_2 + 2.199x_2x_3 + 11.49x_1x_3 - 5.02x_1^2 + 6.42x_2^2 + 4.29x_3^2$$

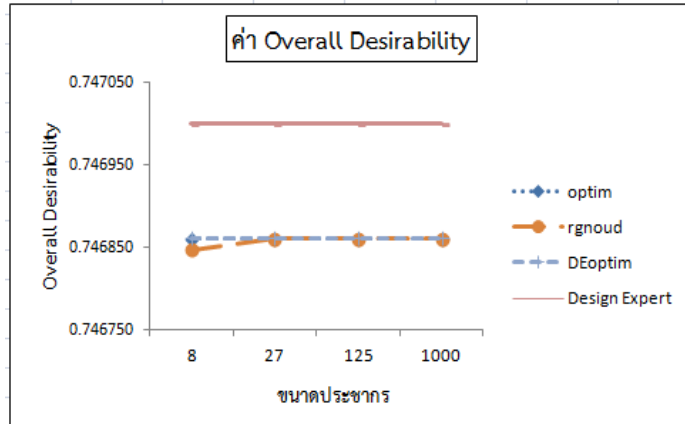
ผลการวิจัย

สำหรับแผนการทดลอง CCD พบว่า การใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Simulated-annealing (SANN) สำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง ใช้เวลามากที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ แสดงดังภาพที่ 7ก และแพ็คเกจ "rgenoud" ใช้เวลาน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ ดังแสดงไว้ในภาพที่ 7(ข) นอกจากนี้แล้วพบว่าการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Nelder และ Mead, quasi-Newton (BFGs), conjugate gradients (CG), box constraints (L-BFGs-B), Simulated-annealing (SANN), แพ็คเกจ "rgenoud" และ แพ็คเกจ "DEoptim" จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ขนาดของประชากรเท่ากับ 8, 27, 125 และ 1,000 เท่ากับ 0.7468608 ซึ่งมีค่าใกล้เคียงกับค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.747 แต่อย่างไรก็ตามสำหรับแพ็คเกจ "rgenoud" ที่ขนาดประชากรมีค่าเท่ากับ 8 จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability ต่ำกว่าฟังก์ชัน "optim" และ แพ็คเกจ "DEoptim" เล็กน้อย แต่เมื่อเพิ่มขนาดของประชากรมากขึ้น แพ็คเกจ "rgenoud" ก็สามารถให้ค่าสูงสุดของ overall Desirability ได้เท่ากับฟังก์ชัน "optim" และแพ็คเกจ "DEoptim" ดังแสดงในภาพ 8ก

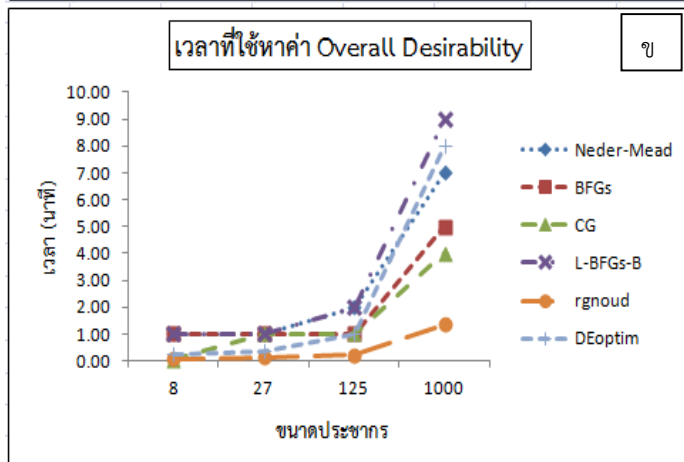
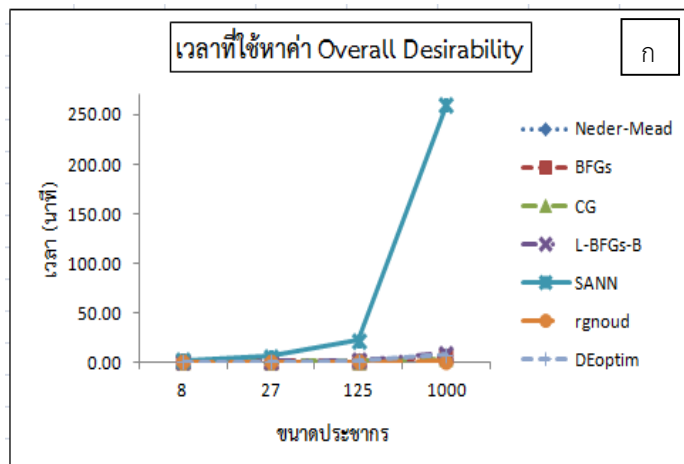


ภาพที่ 7 เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability สำหรับ CCD

ก) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ของทุกวิธี ข) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ยกเว้นวิธี SANN



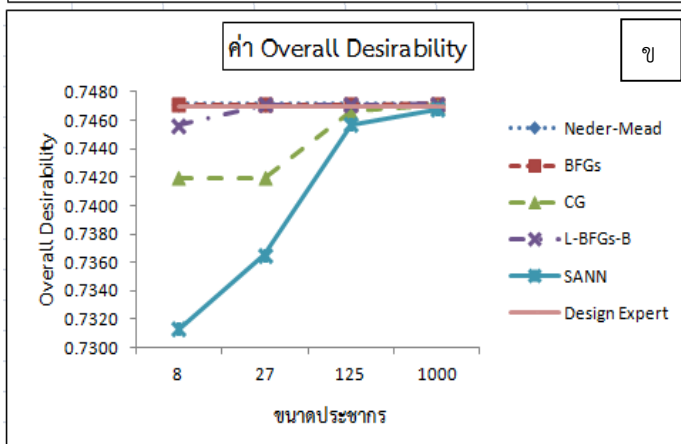
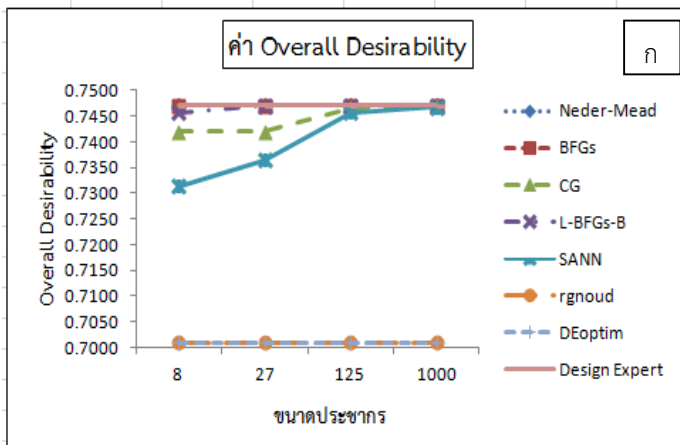
ภาพที่ 8 ค่า Overall Desirability สำหรับ CCD



ภาพที่ 9 เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability สำหรับ GA14

ก) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ของทุกวิธี ข) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ยกเว้นวิธี SANN

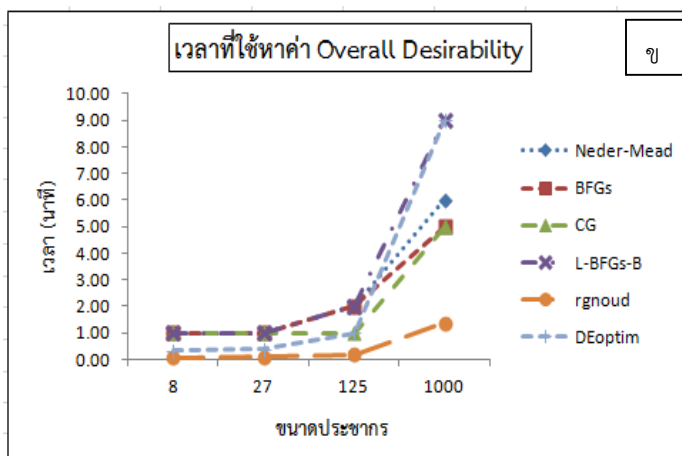
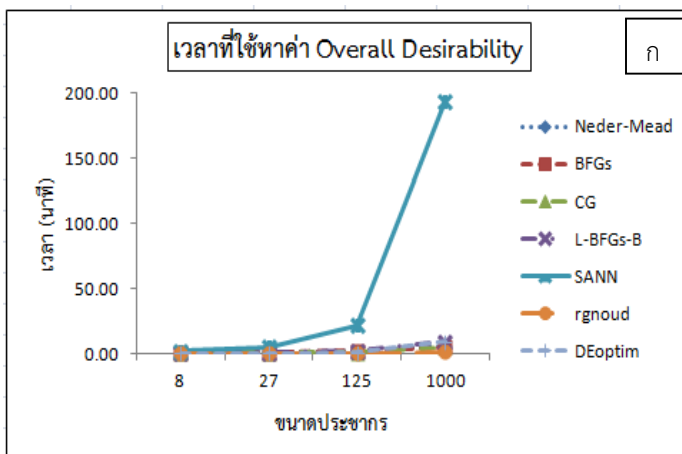
สำหรับแผนการทดลอง GA14 พบว่าการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Simulated-annealing (SANN) สำหรับการคำนวณค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงใช้เวลาามากที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ ดังภาพที่ 9ก และแพ็คเกจ "rgenoud" ใช้เวลาน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ ดังภาพที่ 9ข นอกจากนี้แล้วพบว่าการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Nelder และ Mead จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ขนาดประชากรเท่ากับ 8, 27, 125 และ 1,000 เท่ากับ 0.7471575 ซึ่งเป็นค่าที่ใกล้เคียงกับค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert (0.747) มากกว่าวิธีอื่น ๆ และในส่วนของการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี quasi-Newton (BFGs), conjugate gradients (CG), box constraints (L-BFGs-B) และ Simulated-annealing (SANN) จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability เพิ่มขึ้นและมีค่าสูงสุดของ overall desirability ใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากโปรแกรม Design Expert เมื่อขนาดตัวอย่างเพิ่มขึ้น ดังภาพที่ 10ข แต่อย่างไรก็ตามสำหรับแพ็คเกจ "rgenoud" และ แพ็คเกจ "DEoptim" ให้ค่าสูงสุดของ overall desirability เท่ากับ 0.7009056 กับทุก ๆ ขนาดของประชากร ดังภาพที่ 10ก ซึ่งมีค่าต่ำกว่าค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert



ภาพที่ 10 ค่า Overall Desirability สำหรับ GA14

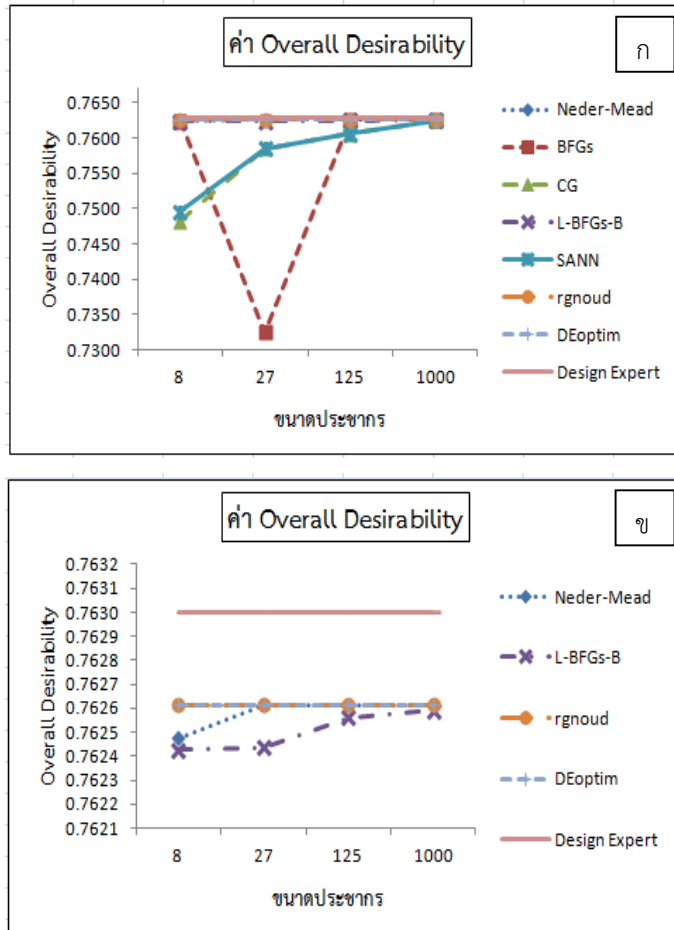
ก) ค่า Overall Desirability ของทุกวิธี ข) ค่า Overall Desirability ยกเว้นวิธี rgenoud และ DEoptim

สำหรับแผนการทดลอง GA10 พบว่า การใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี simulated-annealing (SANN) สำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงใช้เวลาามากที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ ดังภาพที่ 11ก และแพ็คเกจ "rgenoud" ใช้เวลาน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ ดังภาพที่ 11ข นอกจากนี้แล้ว พบว่า การใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Nelder and Mead, แพ็คเกจ "rgenoud" และ แพ็คเกจ "DEoptim" จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ขนาดประชากรเป็น 27, 125 และ 1,000 เท่ากับ 0.7626133 ซึ่งเป็นค่าที่ใกล้เคียงกับค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert (0.763) มากกว่าวิธีอื่น ๆ ดังภาพที่ 12(ข) และในส่วนของ การใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี quasi-Newton (BFGs), Conjugate gradients (CG), box constraints (L-BFGs-B) และ Simulated-annealing (SANN) จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability เพิ่มขึ้นและมีค่าสูงสุดของ overall desirability ใกล้เคียงกับค่าที่ได้ จากโปรแกรม Design Expert เมื่อขนาดตัวอย่างเพิ่มขึ้น



ภาพที่ 11 เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability สำหรับ GA10

ก) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ของทุกวิธี ข) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ยกเว้นวิธี SANN



ภาพที่ 12 ค่า Overall Desirability สำหรับ GA10

ก) ค่า Overall Desirability ของทุกวิธี ข) เวลาที่ใช้หาค่า Overall Desirability ยกเว้นวิธี SANN, CG และ BFGs

อภิปรายผล

ผลการเปรียบเทียบฟังก์ชัน "optim" แพ็คเกจ "rngnoud" และ แพ็คเกจ "DEoptim" ของโปรแกรม R สำหรับใช้หาค่าที่เหมาะสมสำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว แสดงให้เห็นว่าการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี Nelder และ Mead จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability เทียบเท่าหรือใกล้เคียงกับค่าสูงสุดของ overall desirability ที่ได้จากโปรแกรม Design Expert ซึ่งมีผลให้ได้ค่าเหมาะสมที่แท้จริง ซึ่งได้แก่เซตของตัวแปรอิสระ และตัวแปรตามมีค่าเท่ากันหรือใกล้เคียงกับค่าเหมาะสมที่แท้จริงที่ได้จากโปรแกรม Design Expert อีกด้วย แต่อย่างไรก็ตามการใช้ฟังก์ชัน "optim" โดยใช้วิธี quasi-Newton (BFGs), conjugate gradients (CG), box constraints (L-BFGs-B) และ simulated-annealing (SANN) จะให้ค่าสูงสุดของ overall desirability เพิ่มขึ้นและมีค่าสูงสุดของ overall desirability เท่ากับหรือใกล้เคียงกับค่าที่ได้จากโปรแกรม Design Expert เมื่อขนาดตัวอย่างเพิ่มขึ้นแต่เวลาที่ใช้สำหรับการคำนวณก็เพิ่มขึ้นเช่นกัน นอกจากนี้งานวิจัยครั้งนี้แสดงให้เห็น

เห็นว่าการใช้แพ็คเกจ “rgenoud” จะใช้เวลาสำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงน้อยที่สุดเมื่อเทียบกับวิธีการอื่น ๆ และพบว่าการใช้แพ็คเกจ “rgenoud” และแพ็คเกจ “DEoptim” สำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงโดยพิจารณาจากค่าสูงสุดของ overall desirability อาจจะเหมาะสมสำหรับแผนการทดลองหรือสมการพยากรณ์บางชนิดเท่านั้น อีกทั้งยังพบว่าการตั้งค่าในแพ็คเกจ “rgenoud” และแพ็คเกจ “DEoptim” สำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง โดยพิจารณาจากค่าสูงสุดของ overall desirability ค่อยข้างจะทำได้ยากกว่าการใช้ฟังก์ชัน “optim” แต่อย่างไรก็ตามยังมีแพ็คเกจอีกหนึ่งในโปรแกรม R ที่เป็นแพ็คเกจที่น่าสนใจสำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงโดยพิจารณาจากค่าสูงสุดของ overall desirability นั่นคือ แพ็คเกจ “GA” ซึ่งผู้วิจัยจะทำการศึกษาแพ็คเกจดังกล่าวนี้ในงานวิจัยชิ้นต่อไปเพื่อให้ได้วิธีการที่ดีที่สุดสำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริงโดยพิจารณาฟังก์ชัน desirability ของ Derringer และ Suich ต่อไป

สรุปผลการวิจัย

จากผลการเปรียบเทียบที่ได้จากงานวิจัยครั้งนี้สรุปได้ว่า ฟังก์ชัน “optim” โดยใช้วิธี Nelder and Mead เป็นวิธีที่เหมาะสมสำหรับการคำนวณหาค่าที่เหมาะสมที่แท้จริง สำหรับกระบวนการพื้นผิวตอบสนองกรณีที่มีตัวแปรตามหลายตัว โดยพิจารณาจากค่าสูงสุดของ overall desirability ที่มากที่สุด ซึ่งเป็นฟังก์ชัน desirability ของ Derringer and Suich

กิตติกรรมประกาศ

งานวิจัยครั้งนี้ได้รับการสนับสนุนจากสถาบันวิจัยและพัฒนา มหาวิทยาลัยราชภัฏพิบูลสงคราม

เอกสารอ้างอิง

- Akteke-Ozturk B. (2010). **New Approaches to Desirability Function by Nonsmooth and Nonlinear Optimization**. Ph.D. dissertation. Middle East Technical University.
- Borkowski, J.J. (2003). Using a genetic algorithm to generate small exact response surface designs. **Journal of Probability and Statistical Science**, 1, 65-88.
- Del Castillo, E., Montgomery, D.C. & McCarville, D.R. (1996). Modified desirability functions for multiple response optimizations. **Journal of Quality Technology**, 28, 337-345.
- Derringer, G. & Suich, R. (1980). Simultaneous optimization of several response variables. **Journal of Quality Technology**, 12, 214-219.
- Francisco, O., James, R.S. & Joseph, J.P. (2004). A genetic algorithm to multiple-response optimization. **Journal of Quality Technology**, 36(4), 432-450.
- Harrington, E.C. (1965). The desirability function. **Industrial Quality Control**, 21, 494-498.
- Kuhn, M. (2015). **The Desirability Package**. <https://cran.r-project.org/web/packages/desirability/vignettes/desirability.pdf>. January 9, 2016.
- Lawson, J. (2015). **Design and Analysis of Experiments with R**. Florida. Salt Lake City: Chapman & Hall.
- Mebane, W.R. & Sekhon J.S. (2011). Genetic optimization using derivatives: the reground package for R. **Journal of Statistical Software**, 42(11), 1-26.
- Mullen, K.M., Ardia, D., Gil, D.L., Windover, D., Cline, J. (2011). DEoptim: An R Package for Global Optimization by Differential Evaluation. **Journal of Statistical Software**, 40(6), 1-26.

- Myers, R.H., Montgomery, D.C. & Anderson-Cook, C.M., (2009). **Response Surface Methodology Process and Product Optimization Using Designed Experiments**. New York: John Wiley & Sons.
- Scrucca, L. (2013). GA: A package for genetic algorithms in R. **Journal of Statistical Software**, 53, 1-37.
- Vining, G.G. (1998). A compromise approach to multi-response optimization. **Journal of Quality Technology**, 30, 309-313.