

## บทที่ 2

### ทฤษฎีพื้นฐาน

#### 2.1 บทนำ

สิ่งที่มนุษย์ต้องการในการดำรงชีวิตนั้นอันดับแรกคืออาหาร และสิ่งที่รองลงมาคือเครื่องนุ่งห่มเพื่อป้องกันตนเองจากแสงอาทิตย์ ลมและความหนาวเย็น ซึ่งในปัจจุบันนี้เสื้อผ้าที่ใส่กันนั้นยังเป็นสิ่งที่แสดงบุคลิกส่วนบุคคลด้วย

ในปัจจุบันเส้นใยที่ได้จากธรรมชาติ เช่น ฝ้าย ขนแกะ ไหม ปอ กระเจา และลินินได้รับความนิยมชมชอบเป็นอย่างมาก แต่เนื่องจากการเพิ่มขึ้นอย่างรวดเร็วของจำนวนประชากร ทำให้การผลิตเส้นใยจากธรรมชาติจึงไม่เพียงพอกับความต้องการ ต่อมาได้มีการคิดค้นการสังเคราะห์เส้นใยขึ้น และทำการพัฒนาให้เหมาะสมกับการใช้งานมากขึ้น นอกจากนี้นักวิทยาศาสตร์ได้พยายามพัฒนาเส้นใยสังเคราะห์ให้มีคุณสมบัติดีกว่าเส้นใยธรรมชาติ และในเส้นใยสังเคราะห์ทั้งหมดนั้น เส้นใยสังเคราะห์พอลิเอสเตอร์คือเส้นใยชนิดหนึ่งที่นิยมใช้ และมีการผลิตเป็นจำนวนมาก

พอลิเอสเตอร์ คือชื่อในทางการค้าส่วนชื่อในทางวิทยาศาสตร์ คือ พอลิเอทิลีน เทอเรฟทาเลต (Poly (ethylene terephthalate), PET ต่อไปจะเรียกโดยย่อว่าพีอีที) เป็นวัสดุที่มีความสำคัญต่อการผลิตเส้นใยสังเคราะห์ ฟิล์มและพลาสติก ขั้นตอนการผลิตพอลิเอสเตอร์ ขั้นตอนหลักที่สำคัญมี 3 ขั้นตอน คือ

1. ขั้นตอนทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน หรือเอสเตอร์ริฟิเคชันแบบโดยตรง
2. ขั้นตอนก่อนพอลิเมอไรเซชัน
3. ขั้นตอนพอลิคอนเด็นเซชัน

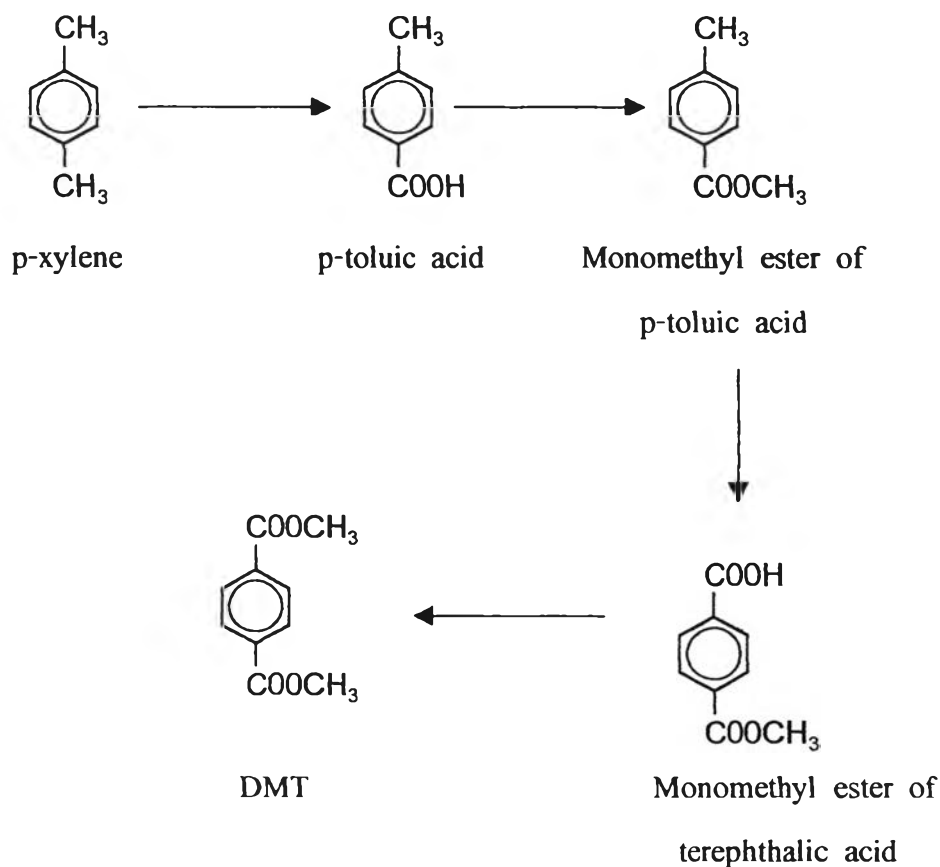
วัตถุดิบที่สำคัญ 2 ตัวที่ใช้ในขั้นตอนทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน คือดีเอ็มทีและอีจี แต่สำหรับขบวนการผลิตแบบเอสเตอร์ริฟิเคชันแบบโดยตรงวัตถุดิบที่สำคัญ คือทีพีเอ และอีจี

ตัวเร่งปฏิกิริยาที่ใช้ในการผลิตพอลิเอสเทอร์ จะทำให้เกิดผลิตภัณฑ์จากปฏิกิริยาข้างเคียง เช่น คีอีจี กลุ่มโมเลกุลที่มีกรดคิคที่ปลายโซ่ กลุ่มโมเลกุลที่มีไวนิลที่ปลายโซ่ (Vinyl end group) และน้ำ ซึ่งสารดังกล่าวข้างต้นจะมีผลต่อคุณภาพของพอลิเอสเทอร์ที่ผลิตได้

## 2.2 วัตถุดิบ

### 2.2.1 ดีเอ็มที

ดีเอ็มทีเป็นวัตถุดิบที่ใช้ในการผลิตพอลิเอสเทอร์ สำหรับขบวนการผลิตดีเอ็มทีเป็นการออกซิเดชันของพาราไซลีน (P-xylene oxidation) แล้วเกิดปฏิกิริยาเอสเตอร์ริฟิเคชัน ดังสมการ



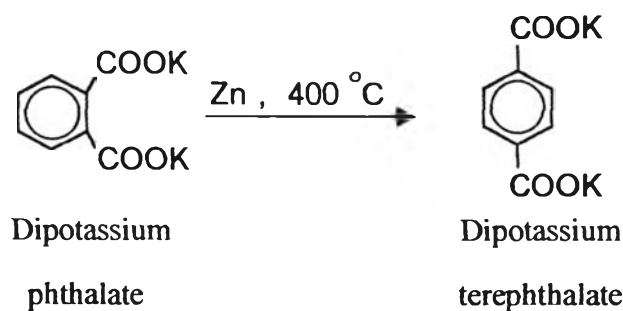
ต่อมาได้มีการปรับปรุงกระบวนการเตรียมดีเอ็มทีโดย Hercules (1932) แต่กระบวนการเตรียมก็ยังคงเป็นการทำออกซิเดชันและเอสเตอร์ริฟิเคชันของพาราไซลีน เช่นเดิม

## 2.2.2 ทีพีเอ

สำหรับการเตรียมทีพีเอมีอยู่หลายขบวนการดังต่อไปนี้

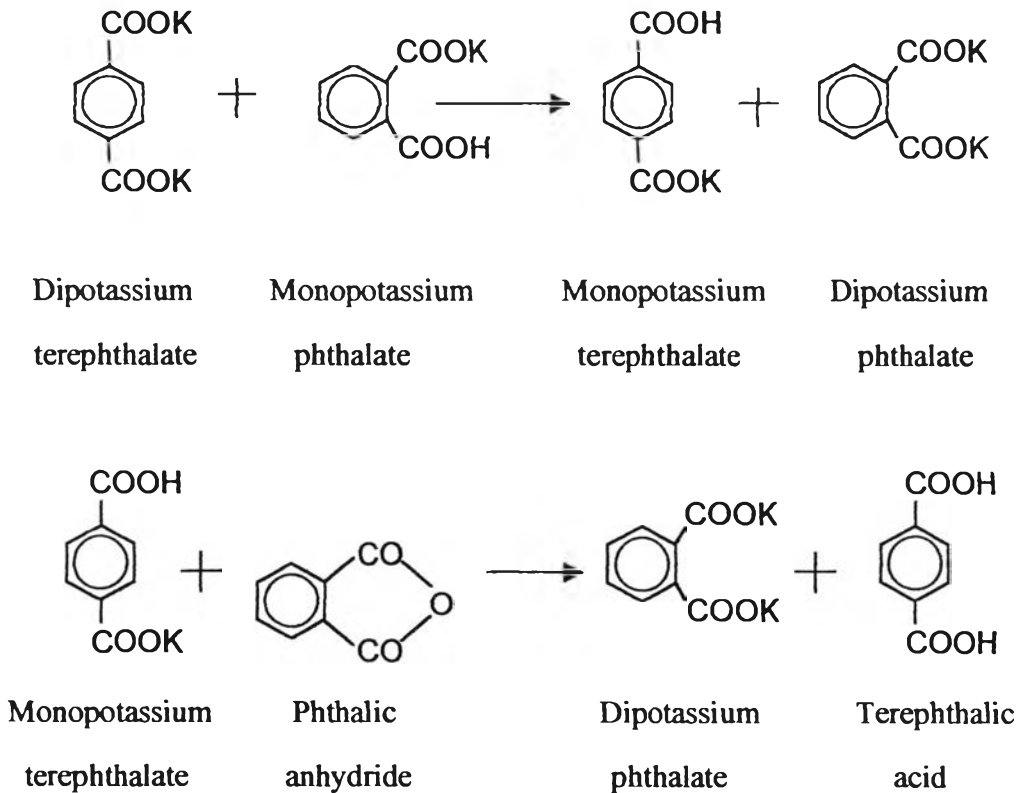
### 2.2.2.1 ขบวนการ Henkel – I

บริษัท Henkel และ Cie GmbH ได้เป็นผู้ริเริ่มขบวนการทางเคมีนี้ขึ้นในช่วงปี 1966 แต่ขบวนการดังกล่าวมาประสบความสำเร็จในการผลิตเชิงพาณิชย์ในประเทศญี่ปุ่นโดย Teijin และ Kawasaki ขบวนการผลิตจะเริ่มจากการเติมพthalic anhydride หรือออโตไซลีน (O-Xylene) จะได้เป็นไดโปแตสเซียมพthalate (Dipotassium phthalate) และจะถูกล้างด้วยสังกะสี (Zinc) ซึ่งทำหน้าที่เป็นตัวเร่งปฏิกิริยาให้เกิดไอโซเมอร์ให้กลายเป็นไดโปแตสเซียมเทอเรพthalate (Dipotassium Terephthalate) ที่อุณหภูมิสูงกว่า 400 °C ภายใต้สภาวะที่มีคาร์บอนไดออกไซด์ (CO<sub>2</sub>) ซึ่งมีความดันบรรยากาศ 5-20 บรรยากาศ ดังสมการปฏิกิริยาต่อไปนี้



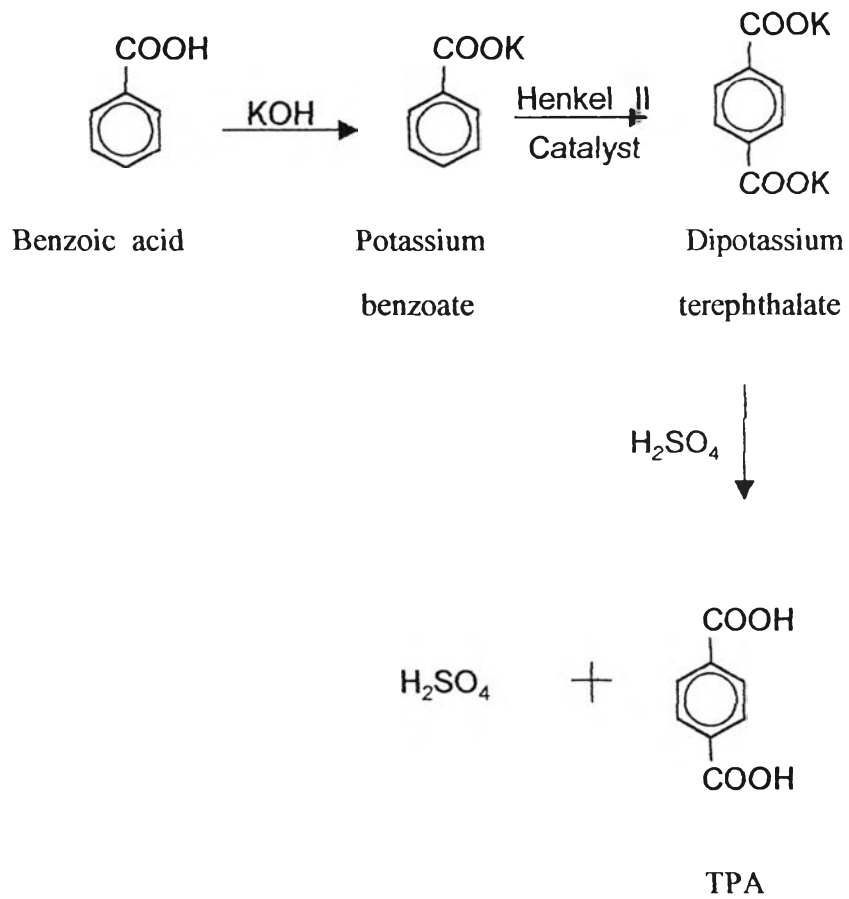
ไดโปแตสเซียมเทอเรพthalate จะละลายในน้ำ และสารละลายที่ผ่านขบวนการดูดซับด้วย Activated carbon ซึ่งสารละลายนี้จะผสมด้วยสารละลายโมโนโปแตสเซียมพthalate (Monopotassium phthalate) ได้เป็นโมโนโปแตสเซียมเทอเรพthalate

(Monopotassium terephthalate) ซึ่งจะตกตะกอนพร้อมกับไดโปแตสเซียมฟทาเลต (Dipotassium phthalate) จากนั้นโมโนโปแตสเซียมเทอเรฟทาเลตจะเกิดปฏิกิริยากับพทาติกแอนไฮไดรด์ได้กรดเทอเรฟทาติกที่มีความบริสุทธิ์สูงตกตะกอนออกมาพร้อมกับไดโปแตสเซียมฟทาเลตดังสมการปฏิกิริยา



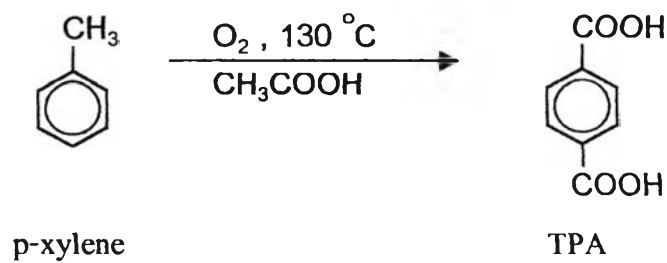
#### 2.2.2.2 ขบวนการ Henkel – II

เป็นการเตรียมโปแตสเซียมเบนโซเอต (Potassium benzoate) จากกรดเบนโซอิก (Benzoic acid) จากนั้นโปแตสเซียมเบนโซเอตจะถูกทำให้แห้งด้วยแคดเมียม (Cadmium) หรือซิงค์เบนโซเอต (Zinc benzoate) ซึ่งทำหน้าที่เป็นตัวเร่งปฏิกิริยา โปแตสเซียมเบนโซเอตสามารถทำปฏิกิริยาที่อุณหภูมิ 400°C ภายใต้สภาวะก๊าซคาร์บอนไดออกไซด์ที่มีความดัน 60 บรรยากาศ ได้เป็นไดโปแตสเซียมเทอเรฟทาเลตที่สามารถกรองออกโดยผ่าน activated carbon ได้ที่พีเอทีที่มีความบริสุทธิ์สูงโดยวิธีการเติมกรดซัลฟูริก (H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) ลงไปดังสมการปฏิกิริยาต่อไปนี้



### 2.2.2.3 ขบวนการ Mobil

ขบวนการนี้จะอาศัยการเกิดออกซิเดชันของพาราไซลีนซึ่งวิธีการได้รับการพัฒนาโดยบริษัท โมบิลเคมีคอล จำกัด ซึ่งพาราไซลีนจะสามารถเปลี่ยนไปเป็นที่พีเอตังสมการปฏิกิริยา



### 2.2.3 อีจี

อีจีเป็นวัตถุดิบอีกชนิดหนึ่งที่ใช้ในการผลิตพอลิเอสเตอร์ซึ่งจะผลิตได้จากเอทิลีน (Ethylene) ซึ่งในขั้นแรกเอทิลีนจะถูกออกซิไดส์ด้วยอากาศหรือออกซิเจนทำให้ได้เป็นเอทิลีนออกไซด์ (Ethylene oxide) ซึ่งจะดูดซับในน้ำทำให้ได้อีจีโดยขบวนการผลิตนี้ มีชื่อว่า “Oxidation Process”

บริษัท ออกซีเรน จำกัด (Oxyrane Co., Ltd) ประเทศอเมริกาได้พัฒนาการผลิตอีจีจาก เอทิลีน โดยขบวนการผลิตใหม่ที่มีชื่อว่า “Acetoxylation process” โดยที่เอทิลีนจะเกิดปฏิกิริยาด้วยกรด อะซิติก และออกซิเจนทำให้ได้เป็นไกลคอลอะซิเตท และจะเกิดการไฮโดรไลซิส (Hydrolysis) ทำให้ได้เป็นอีจี และขบวนการผลิตวิธีหลังนี้จะได้ปริมาณอีจีถึง 90 เปอร์เซ็นต์ ในขณะที่วิธีแรกได้ปริมาณอีจีแค่ 70 เปอร์เซ็นต์

## 2.3 ขบวนการผลิตพอลิเอสเตอร์

### 2.3.1 ชนิดของพอลิเมอร์

เป็นที่ทราบและยอมรับกันทั่วไปว่ามีการแบ่งพอลิเมอร์ออกเป็น 2 ชนิดดังนี้

2.3.1.1 พอลิเมอร์ชนิดเทอร์โมพลาสติก (Thermoplastic polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เมื่อโดนความร้อนจะถูกหลอม และสามารถนำกลับมาขึ้นรูปใหม่ได้ ตัวอย่างเช่น พอลิเอสเตอร์ ไนลอน พอลิโพรพิลีน (Polypropylene) และพอลิอะคริโลไนไตรล์ (Polyacrylonitrile)

2.3.1.2 พอลิเมอร์ชนิดเทอร์โมเซต (Thermosetting polymer) เป็นพอลิเมอร์ที่เมื่อได้รับความร้อนแล้วจะถูกหลอมและเสียรูปทรง และไม่สามารถนำกลับมาขึ้นรูปใหม่ได้ เป็นพอลิเมอร์ชนิดโซ่ยาว (Long chain) มีการเรียงตัวของโมเลกุลเป็นแบบร่างแห (Network) ซึ่งเรียกว่า Crosslink ตัวอย่างเช่น พอลิยูเรเทน (Polyurethane) ฟีนอลฟอร์มัลดีไฮด์ (Phenol-formaldehyde) ยูเรียฟอร์มัลดีไฮด์ (Urea-formaldehyde)

### 2.3.2 ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชัน

ในการสังเคราะห์พอลิเมอร์โดยทั่วไปแล้วจะมีปฏิกิริยา 2 ชนิด คือ

2.3.2.1 ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชัน แบบขั้นหรือแบบควบแน่น (Step or condensation polymerization reaction)

ในกรณีของปฏิกิริยาแบบนี้ จะเป็นการทำปฏิกิริยาระหว่าง 2 โมเลกุลแล้วทำการกำจัดโมเลกุลเล็ก ๆ ออก เช่น น้ำ ตัวอย่างพอลิเมอร์ที่เกิดจากปฏิกิริยาแบบนี้ได้แก่ พอลิเอสเตอร์ ไนลอน

2.3.2.2 ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันแบบโซ่หรือแบบเพิ่มเติม (Chain or additional polymerization)

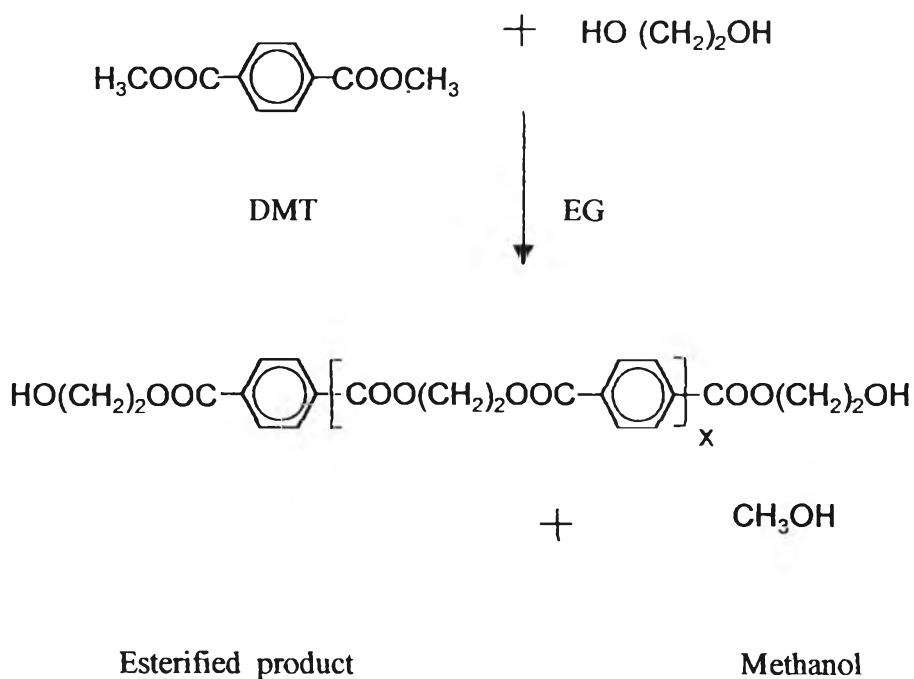
ปฏิกิริยาชนิดนี้จะเป็นการรวมตัวโดยใช้โมเลกุลที่ไม่อิ่มตัว ดังนั้นจึงไม่มีการกำจัดโมเลกุลอื่นออกไป ตัวอย่างพอลิเมอร์ที่เกิดจากปฏิกิริยาแบบนี้ได้แก่ พอลิโพรพิลีน พอลิอะคริโลไนไตรล์

### 2.3.3 ปฏิกิริยาเคมีที่ใช้ในการผลิตพอลิเอสเทอร์

เป็นที่ทราบกันว่าพอลิเอสเทอร์นั้นสามารถผลิตได้จากปฏิกิริยาหลายรูปแบบ เช่น ในการผลิตสามารถเริ่มจากปฏิกิริยา ทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชันหรือเอสเตอร์ริฟิเคชันแบบโดยตรง แล้วจึงนำไปทำปฏิกิริยาพอลิคอนเดนชันเซชัน ดังรายละเอียดต่อไปนี้

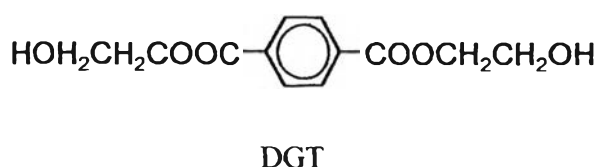
#### 2.3.3.1 ปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชัน

เมื่อดีเอ็มทีและอีจีถูกนำมาใช้เป็นวัตถุดิบเริ่มต้นในขบวนการผลิตจะได้ปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอร์ริฟิเคชันดังปฏิกิริยา



(เมื่อ  $x = 0 - 4$ )

ผลิตภัณฑ์หลักของ Esterified product คือไดไกลคอลเทอเรฟทาเลต (Diglycol terephthalate , DGT ต่อไปจะเรียกโดยย่อว่าดีจีที) ในกรณีที่  $x$  เป็นศูนย์ในส่วนของ ดีจีทีจะมีโครงสร้างดังนี้





ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นระหว่างคีเอ็มทีกับอีจีจะมีอุณหภูมิอยู่ในช่วง  $190^{\circ}\text{C}$  ถึง  $220^{\circ}\text{C}$  และอัตราการเกิดปฏิกิริยาจะช้าจึงมีการใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาเพื่อลดเวลาในการทำปฏิกิริยาลง ซึ่งตัวเร่งปฏิกิริยาในโรงงานที่ใช้ทั่ว ๆ ไป ได้แก่ Cobalt acetate, Zinc, Lead, Manganese, Sodium และ Cadmium โดยสามารถเรียงลำดับ Selectivity ได้ดังนี้



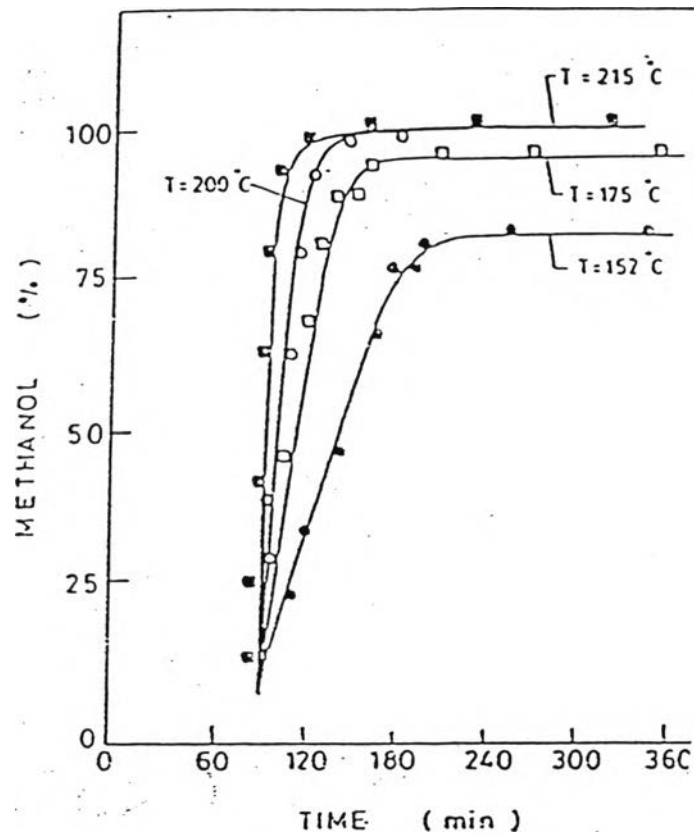
โดยปกติแล้ว จะใช้ตัวเร่งปฏิกิริยาที่มี Selectivity สูงเพื่อที่จะลดปฏิกิริยาข้างเคียง

### ช่วงอุณหภูมิของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชัน

ปฏิกิริยาระหว่างคีเอ็มทีกับอีจีจะเกิดที่อุณหภูมิ  $150^{\circ}\text{C}$  ในกรณีที่มีตัวเร่งปฏิกิริยาที่เหมาะสมแต่ในอุตสาหกรรมจะควบคุมอุณหภูมิให้อยู่ในช่วง  $150^{\circ}\text{C}$  ถึง  $220^{\circ}\text{C}$  จากกราฟรูปที่ 2-1 จะแสดงให้เห็นถึงการเปลี่ยนแปลงของเอสเทอร์ (Ester) ที่อุณหภูมิต่าง ๆ โดยทั่ว ๆ ไปแล้วปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชันที่อุณหภูมิ  $150^{\circ}\text{C}$  ถึง  $175^{\circ}\text{C}$  จะเกิดช้า และส่วนใหญ่ในอุตสาหกรรมจะทำปฏิกิริยาที่อุณหภูมิสูงกว่า  $170^{\circ}\text{C}$  ซึ่งที่ อุณหภูมินี้จะสามารถแยกเมธานอลออกได้อย่างสมบูรณ์

### ปริมาณอีจีที่มากพอของปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์ริฟิเคชัน

ในปฏิกิริยาชนิดนี้ถ้ามีปริมาณอีจีมากเกินไปนั้น จะเป็นผลดีที่ทำให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของเอสเทอร์มาก เนื่องจากจะทำให้สมดุลของปฏิกิริยานั้นขยับไปทางที่ทำให้เกิดเอสเทอร์มากขึ้น แต่อย่างไรก็ตามถ้ามีปริมาณอีจีมากเกินไปมาก ๆ จะทำให้เกิดข้อเสียคือจะทำให้เวลาในการแยกสกัดนานขึ้น เนื่องจากจะต้องทำการกลั่นอีจีและคีอีจีที่มากเกินไปออก ดังนั้นการใช้ปริมาณอีจีควรให้มากเกินไปในปริมาณที่พอเหมาะ

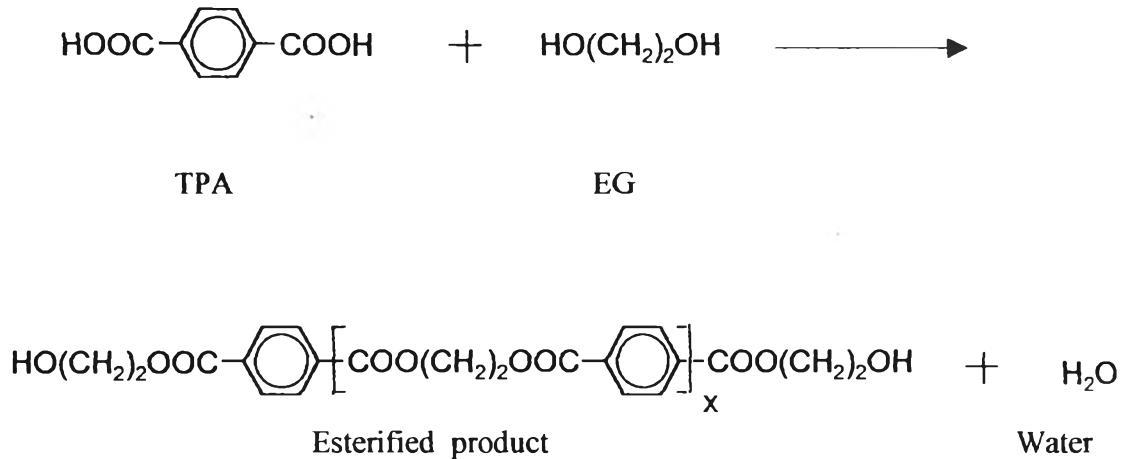


รูปที่ 2-1 กราฟแสดงผลของอุณหภูมิต่อค่าร้อยละการเปลี่ยนแปลงดีเอ็มที

ที่มา : Vaidra, A.A. *Production of Synthetic Fibre*. New Delhi: Prentice-Hall of India Private Limited, (1988): 38

### 2.3.3.2 ปฏิกิริยาเอสเทอร์รีฟิเคชันแบบโดยตรง

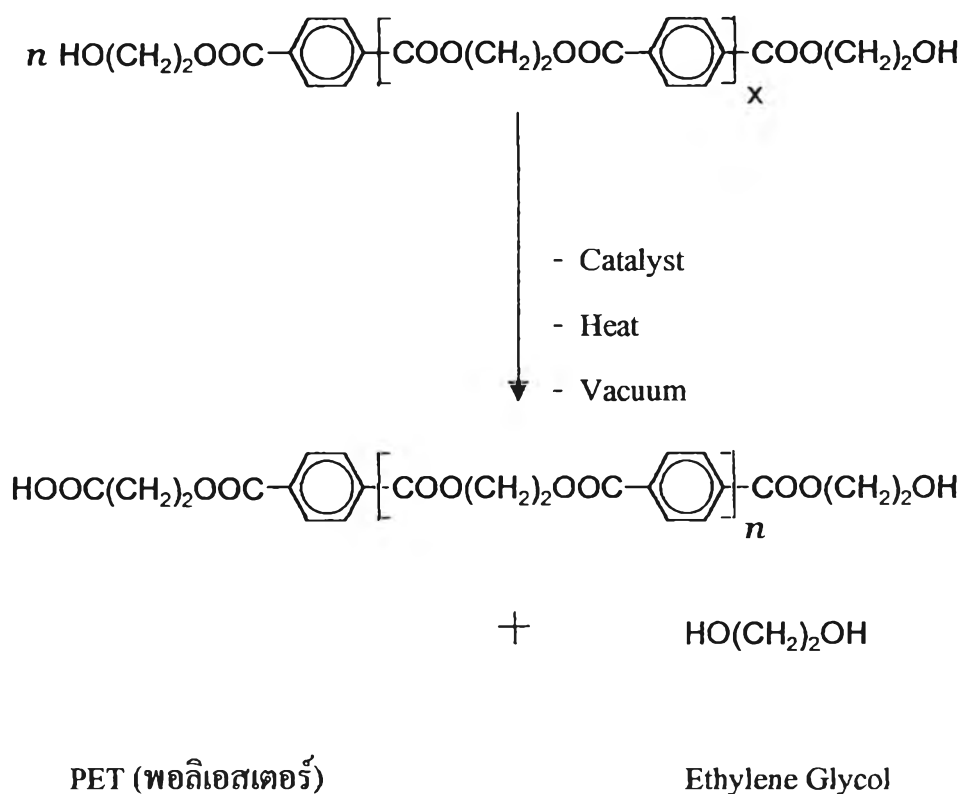
เมื่อทีพีเอและอีจีถูกนำมาใช้เป็นวัตถุดิบเริ่มต้น ในขบวนการผลิตจะเกิดปฏิกิริยาเอสเทอร์รีฟิเคชันแบบ โดยตรงดังปฏิกิริยา



ในทำนองเดียวกันผลิตภัณฑ์หลักคือ Esterified product เหมือนกับปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์รีฟิเคชัน แต่อุณหภูมิของปฏิกิริยาเอสเทอร์รีฟิเคชันแบบโดยตรง จะอยู่ในช่วง 240 °C ถึง 260 °C ที่ความดันบรรยากาศ และสัดส่วน โมลของทีพีเอต่ออีจีคือ 1:1.00 ถึง 1:1.30 และในระหว่างการเกิดปฏิกิริยาเอสเทอร์รีฟิเคชันแบบ โดยตรงนั้นน้ำจะถูกกำจัดออกโดยการกลั่น

### 2.3.3.3 ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันแบบควบแน่น

ปฏิกิริยาในขั้นนี้เป็นปฏิกิริยาที่จำเป็นต่อการผลิตพอลิเอสเทอร์ และเป็นขั้นตอนต่อจากปฏิกิริยาทรานส์เอสเทอร์รีฟิเคชัน หรือปฏิกิริยาเอสเทอร์รีฟิเคชันแบบ โดยตรง ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับวัตถุดิบเริ่มต้น สำหรับปฏิกิริยานี้โดยหลักการก็คือ การควบแน่นคีจิติเป็น ไดเมอร์ (Dimer) ไตรเมอร์ (Trimer) และเตตระเมอร์ (Tetramer) จนเป็นพอลิเมอร์ที่มีชื่อว่าพอลิเอสเทอร์เมื่อทำการให้ความร้อนสูงภายใต้สุญญากาศ (Vacuum) เพื่อให้ได้พอลิเอสเทอร์กับเอทิลีนไกลคอลอิสระดังปฏิกิริยา



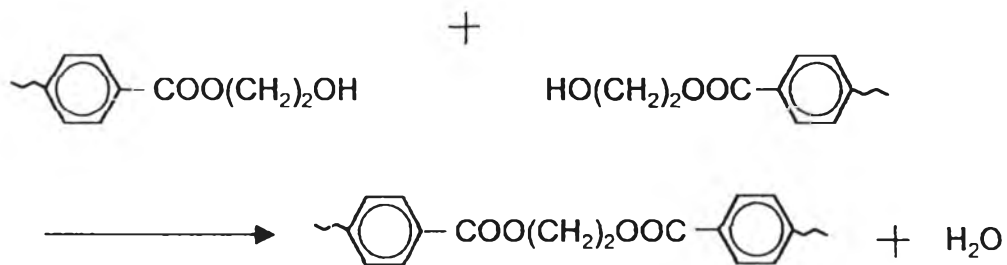
( $n = 80 - 100$ )

ปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันแบบควบแน่นจะใช้ตัวเร่งปฏิกิริยา คือ แอนติโมนีไตรออกไซด์ หรือ แอนติโมนีไตรอะซิเตต (Antimony trioxide or Antimony triacetate) สำหรับอุณหภูมิที่ใช้นั้นจะมีผลต่อค่าระดับของพอลิเมอไรเซชัน (Degree of polymerization) ของพอลิเอสเทอร์ ซึ่งอุณหภูมิที่เหมาะสมของปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันแบบควบแน่นจะอยู่ในช่วง  $270^\circ\text{C}$  ถึง  $285^\circ\text{C}$

#### 2.3.4 ปฏิกิริยาข้างเคียงช่วงการผลิตพอลิเอสเทอร์

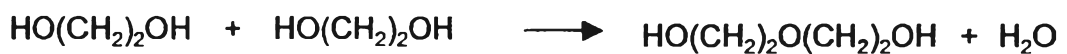
ปฏิกิริยาข้างเคียงที่เกิดขึ้นทั้งในปฏิกิริยาเอสเตอริฟิเคชันและปฏิกิริยาพอลิเมอไรเซชันแบบควบแน่นมีมากมายตัวอย่างเช่น

- การเกิดหมู่อีเทอร์ (Ether group) ระหว่าง พีอีที 2 โมเลกุล ดังปฏิกิริยา



ปฏิกิริยาที่เกิดขึ้นนี้จะทำให้เกิดการต้านการทำงาน (Deactivate) ของตัวเร่งปฏิกิริยาได้และการที่หมู่อีเทอร์ที่เกิดขึ้นมาอาจทำให้พอลิเมอร์นั้นไวต่อความร้อน และอาจเกิด Thermooxidative degradation ได้

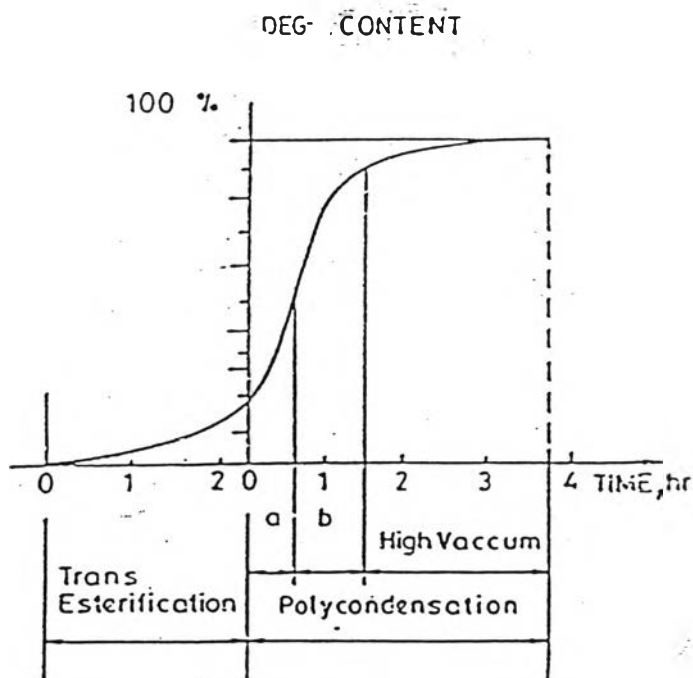
- การเกิดคีอีจี



DEG

คีอีจีเป็นผลิตภัณฑ์ข้างเคียงของปฏิกิริยาทรานส์เอสเตอริฟิเคชันที่อุณหภูมิ 245 °C โดยจุดหลอมเหลวของพอลิเอสเตอ์จะลดลงประมาณ 5 °C ต่อ 1 เปอร์เซ็นต์ของคีอีจีที่เกิดขึ้น โดยคีอีจีจะเป็นตัวที่ทำให้การเชื่อมโยงของสายโซ่พอลิเมอร์อ่อนตัวลงอันจะมีผลไปถึงคุณสมบัติของพอลิเอสเตอ์ และการเพิ่มขึ้นของคีอีจีจะทำให้การติดสีในกระบวนการย้อมเพิ่มขึ้น และจะมีผลไปถึงค่าทางกายภาพของพอลิเอสเตอ์ เช่น การทนแรงดึง (Tensile strength)

แต่อย่างไรก็ตามคุณภาพของเส้นใยไม่คงที่ (Non-Uniform) ถ้าปริมาณของคีอีจี ในพอลิเอสเตอร์ไม่คงที่ ดังนั้นจึงมีความสำคัญมากที่จะต้องรักษาสัดส่วนหรือปริมาณของคีอีจีให้อยู่ในช่วงจำกัด สำหรับการเกิดคีอีจีแสดงดังกราฟรูป2-2



รูปที่ 2-2 กราฟแสดงการเกิดคีอีจีในแต่ละช่วงของปฏิกิริยา

ที่มา: Vaidra, A.A. *Production of Synthetic Fibre*. New Delhi: Prentice-Hall of India Private Limited, (1988): 42

- การเกิดกลุ่มโมเลกุลที่มีกรดคลิดที่ปลายโซ่โมเลกุล เกิดเนื่องจากปฏิกิริยาข้างเคียงและจะมีผลรวมไปถึงการเพิ่มความยาวของสายโซ่โมเลกุล ถ้ากลุ่มโมเลกุลที่มีกรดคลิดที่ปลายโซ่มากจะมีผลทำให้ค่าระดับการเกิดพอลิเมอไรเซชันลดลง

## 2.4 องค์ประกอบของปัญหาการออปติไมซ์

เนื่องจากปฏิกิริยาการเกิดพอลิเอสเตอร์ที่เราสนใจมีความซับซ้อนมาก เพราะมีปฏิกิริยาจำนวนมากเกิดขึ้นพร้อมๆกัน สมการแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของปฏิกิริยาดังกล่าวจึงจำเป็นต้องมีตัวแปรและพารามิเตอร์จำนวนมาก ในการจำลอง (Simulation) การเกิดปฏิกิริยาดังกล่าวนี้เราจะต้องแก้ชุดสมการทั้งหมดพร้อมๆกัน ดังนั้นในการหาคำตอบเราจึงจำเป็นต้องแบ่งขั้นตอนการคิดเป็น 2 ขั้นตอนหลักคือ

ก) ใช้ข้อมูลจริงเพื่อกำหนดค่าพารามิเตอร์ของแบบจำลองโดยอาศัยวิธีออปติไมซ์เซชัน ต่อจากนั้นจึง

ข) นำแบบจำลองมาใช้ซึ่งอาศัยเทคนิค Root finding ในการหาคำตอบซึ่งก็คือความเข้มข้นของสารต่างๆที่เกี่ยวข้องในปฏิกิริยา (รายละเอียดจะกล่าวถึงในบทที่ 3)

การออปติไมซ์ คือการหาจุดที่เหมาะสม เป็นกระบวนการคิดและตัดสินใจทางคณิตศาสตร์เพื่อหาคำตอบที่ดีที่สุด ซึ่งปัญหาการออปติไมซ์มีด้วยกัน 3 องค์ประกอบคือ (Rao, 1979)

2.4.1 ออปเจกทีฟฟังก์ชัน (Objective function) คือค่าที่ต้องการหาค่าสูงสุดหรือต่ำสุด ซึ่งปัญหาในด้านวิศวกรรมศาสตร์จำนวนมากเกี่ยวกับการหาจุดต่ำสุดหรือสูงสุดของฟังก์ชัน สำหรับตัวอย่างออปเจกทีฟฟังก์ชัน ได้แก่ กำไร ค่าใช้จ่าย พลังงานที่ใช้ ระยะเวลาคืนทุน หรือต้นทุน เป็นต้น ฟังก์ชันเหล่านี้ส่วนใหญ่จะเป็นฟังก์ชันทางเศรษฐศาสตร์แต่อาจเป็นฟังก์ชันทางด้านอื่นได้ เช่น ทางด้านเทคโนโลยี ซึ่งจะใช้เป็นเกณฑ์ในการตัดสินใจในการออปติไมซ์ แต่สำหรับในงานวิจัยนี้เราจะใช้ออปเจกทีฟฟังก์ชันที่กำหนดให้ค่าความเข้มข้นของสารต่างๆที่เกี่ยวข้องในปฏิกิริยามีค่าประมาณการแตกต่างจากค่าที่วัดได้น้อยที่สุด

2.4.2 ตัวแปรตัดสินใจ (Decision variable) หมายถึงตัวแปรที่ไม่ทราบค่า และเป็นตัวแปรที่เปลี่ยนแปลงค่าแล้วมีผลต่อออปเจกทีฟฟังก์ชัน ในขั้นตอนการออปติไมซ์ จะเปลี่ยนค่าตัวแปรตัดสินใจเพื่อหาค่าสูงสุดหรือต่ำสุดของออปเจกทีฟฟังก์ชัน ยกตัวอย่างตัวแปรตัดสินใจ เช่น อุณหภูมิ ความดัน อัตราการไหล จำนวนเทรย์ ความเข้มข้นของสาร และขนาดของเครื่องปฏิกรณ์ เป็นต้น

2.4.3 ข้อจำกัด (Constraint) คือ ความสัมพันธ์ของตัวแปรตัวตัดสินใจกับค่าที่แน่นอน เพื่อกำหนดขอบเขตดำเนินการ (feasible region) ของตัวแปรตัดสินใจ หรือพื้นที่ของตัวแปรตัดสินใจที่น่าจะเป็นไปได้ถูกกำหนดขอบเขตโดยข้อจำกัด ซึ่งข้อจำกัดสามารถแบ่งได้เป็น 2 ชนิด คือ

➤ ข้อจำกัดที่เป็นสมการ (Equality Constraint) เป็นข้อจำกัดที่มีเครื่องหมาย = นั่นคือเป็นสมการ ซึ่งแสดงข้อกำหนดของแบบจำลองกระบวนการและผลิตภัณฑ์ เช่น สมการสมดุลมวลสาร สมการสมดุลพลังงาน และสมการผลรวมของเศษส่วนโมล เป็นต้น

➤ ข้อจำกัดที่เป็นอสมการ (Inequality Constraint) เครื่องหมาย  $\neq, >, <, \leq$  หรือ  $\geq$  นั่นคือเป็นอสมการ ซึ่งแสดงข้อกำหนดของการออกแบบ และข้อจำกัดต่าง ๆ เช่น เศษส่วนโมล และค่าอัตราการไหลควรมากกว่าหรือเท่ากับศูนย์ ค่าสูงสุดของความดันของระบบ ค่าสูงสุดปริมาตรของสารที่เครื่องปฏิกรณ์รับได้ และค่าต่ำสุดของอัตราการผลิต หรือความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์

สรุปแล้วการออปติไมซ์จะหมายถึงการหาค่าของตัวแปรตัดสินใจที่มีค่าสอดคล้องกับข้อจำกัด และทำให้ออปเจกทีฟฟังก์ชันมีค่าต่ำสุดหรือสูงสุดตามเกณฑ์ที่ตั้งไว้

ตัวอย่างการนำไปใช้ (Application) ของการออปติไมซ์ในทางด้านวิศวกรรมเคมี ได้แก่ (Edgar และ Himmelblau, 1989 : 9)

1. การหาสถานะการผลิตที่ดีที่สุดของหน่วยปฏิบัติการต่าง ๆ เช่น เครื่องปฏิกรณ์เคมี หอกถัก หรือหอคอยดูดซับ (Absorbers) เป็นต้น
2. การออกแบบกระบวนการของโรงงาน



3. การตรวจสอบความถูกต้องของข้อมูลโรงงานที่ได้จากการวัด เพื่อนำไปใช้ประโยชน์อื่น เช่น การสร้างแบบจำลองของกระบวนการผลิต
4. การหาเส้นทางการกระจายน้ำมันดิบ และผลิตภัณฑ์ของโรงกลั่นน้ำมัน
5. ค่าการจัดสรรทรัพยากร หรือการใช้งานของหน่วยการผลิตต่าง ๆ
6. การออกแบบขนาด และแผนผัง (layout) ของท่อส่ง
7. การหาทำเลที่ดีที่สุดของโรงงาน
8. การลดค่าใช้จ่ายของการเก็บสินค้า หรือผลิตภัณฑ์
9. การกำหนดการบำรุงรักษา และการทดแทนอุปกรณ์การผลิต

#### 2.4.4 การโปรแกรมควอดราติกอย่างเป็นลำดับ (Successive quadratic programming, SQP)

SQP หรือบางที่อาจเรียกว่า Sequential หรือ Recursive Quadratic Programming ซึ่งเป็นวิธีการออปติไมซ์ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่เป็นสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการควอดราติก ซึ่งเป็นลักษณะที่เกิดขึ้นในปัญหาทั่วไป แล้วหาจุดต่ำสุดหรือสูงสุดของสมการควอดราติก โดยมีข้อจำกัดที่เป็นสมการเชิงเส้น ที่ได้จากการประมาณเชิงเส้น (Linearization) สำหรับการพัฒนาของวิธี SQP นั้นเริ่มต้นจาก Wilson (1963) ได้เขียนโปรแกรม SOLVER ที่ใช้สำหรับแก้ปัญหาไม่เชิงเส้น โดยอาศัยหลักการประมาณฟังก์ชันออปเจกทีฟที่ไม่เชิงเส้นเป็นสมการควอดราติกและอาศัยการประมาณแบบเชิงเส้นช่วยประมาณสมการข้อจำกัดให้เป็นสมการเชิงเส้น ซึ่งนับว่าเป็นหลักการของ SQP หลักการ SQP จะเป็นวิธีการแก้ปัญหา Quadratic programming (QP) อย่างเป็นลำดับจนกว่าจะลู่เข้าคำตอบที่เหมาะสมหรือไม่มีการเปลี่ยนแปลงของคำตอบ สำหรับ QP นั้นจะมีลักษณะของข้อจำกัดเป็นเชิงเส้น แต่ออปเจกทีฟฟังก์ชันเป็นสมการควอดราติก ดังนั้น QP จะต่างจากการโปรแกรมแบบเชิงเส้น (LP) ตรงที่สมการออปเจกทีฟฟังก์ชันของปัญหา QP มีเทอมหนึ่งประกอบด้วยตัวแปรกำลังสองหรือตัวแปร 2 ตัวคูณกัน ซึ่ง QP เป็นลักษณะที่เกิดในปัญหาเกี่ยว

ข้องกับการหาจุดต่ำสุดและสูงสุดโดยทั่วไปจึงมีบทบาทสำคัญในหาค่าตอบของสมการไม่เชิงเส้นในวิธีของ SQP

สำหรับในงานวิจัยนี้ใช้โปรแกรมแมทแลบ (MATLAB) ซึ่งมีทูลบ็อกซ์ (Toolbox) สำหรับช่วยแก้ปัญหาไม่เชิงเส้นที่เหมาะสมของปัญหาไม่เชิงเส้น โดยการเรียกใช้ฟังก์ชันคำสั่ง `constr.m` (Grace, 1993) ซึ่งมีลักษณะอัลกอริทึมแบบ SQP ที่เป็นวิธีออปติไมซ์สำหรับปัญหาข้อจำกัดไม่เชิงเส้นที่มีประสิทธิภาพสูง ใช้การคำนวณซ้ำ (iteration) น้อยกว่าวิธีอื่นและเป็นวิธีนิยมในปัจจุบัน

## 2.5 ระเบียบวิธีการหารากของระบบสมการแบบของนิวตัน – ราฟสัน (Newton Raphson method) (ปราโมทย์,2538)

จากที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้นว่าการพิจารณาชุดสมการแบบจำลองของปฏิกริยาการเกิดพอลิเอสเทอร์แบ่งเป็น 2 ขั้นตอน โดยในที่นี้จะขอกกล่าวถึงขั้นที่สอง ซึ่งก็คือการหาคำตอบชุดของสมการที่สามารถหาค่าพารามิเตอร์ที่เหมาะสมได้แล้วจากขั้นตอนออปติไมเซชัน

ปัญหาพื้นฐานที่มักจะประสบอยู่เสมอในขณะที่ทำการวิเคราะห์ปัญหาต่าง ๆ ในทางวิศวกรรมศาสตร์และวิทยาศาสตร์ ก็คือ การหารากของสมการ กล่าวคือ มีฟังก์ชัน  $f(x)$  อยู่ฟังก์ชันหนึ่งและต้องการคำนวณหาค่า  $x$  ซึ่งทำให้ฟังก์ชัน  $f(x)$  นี้มีค่าเท่ากับศูนย์ สมการในรูปแบบดังกล่าวปรกติมักจะอยู่ในรูปแบบของสมการพหุนาม (polynomial) ดังเช่นสมการของฟังก์ชัน  $f(x)$  นี้คือ

$$f(x) = ax^2 + bx + c = 0 \quad (2-1)$$

โดย  $a, b$  และ  $c$  เป็นค่าคงที่ รากของสมการ (2-1) นี้คือ

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (2-2)$$

ในกรณีอื่นสมการของฟังก์ชัน  $f(x)$  อาจจะเป็นสมการพหุนามที่อยู่ในรูปแบบอื่น เช่น

$$f(x) = 2x^4 - 7x^3 + 4x^2 + 7x - 6 = 0 \quad (2-3)$$

ซึ่งอาจแก้โดยเขียนสมการดังกล่าวให้อยู่ในรูปแบบดังนี้

$$(x - 1)(x + 1)(x - 2)(2x - 3) = 0 \quad (2-4)$$

ก่อนแล้วจึงสามารถหาค่าราก  $x$  ต่าง ๆ ได้โดยง่าย

สำหรับปัญหาทางวิศวกรรมศาสตร์และวิทยาศาสตร์โดยทั่วไป ฟังก์ชัน  $f(x)$  ที่เกิดขึ้นนั้นไม่ได้อยู่ในรูปแบบที่ง่ายแก่การแก้ดังเช่นในสมการ (2-1) หรือ (2-3) เสมอไป ยกตัวอย่างเช่นในการออกแบบลักษณะพื้นที่หน้าตัดของเสาที่ติดป้ายให้รถหยุด (stop sign) นั้นต้องคำนึงผลจากการสั่นสะเทือนของเสาเนื่องจากแรงลมที่มาปะทะ ในระหว่างขั้นตอนของการคำนวณดังกล่าวจำเป็นต้องหารากของสมการโดยฟังก์ชัน  $f(x)$  นั้นอยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันอดิศัย (transcendental function) ดังเช่น

$$f(x) = \cosh x \cos x + 1 = 0 \quad (2-5)$$

หรือการคำนวณมุมของคลื่นช็อก (shock wave) ที่เกิดขึ้นบนปีกเครื่องบินซึ่งเอียงทำมุม 20 องศา ในขณะที่บินด้วยความเร็วกว่าเสียง 3 เท่า จำเป็นต้องหารากของสมการที่อยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันอดิศัยดังนี้

$$f(x) = 2 \cot x \left[ \frac{9 \sin^2 x - 1}{9(1.4 + \cos 2x) + 2} \right] - \tan \frac{\pi}{9} = 0 \quad (2-6)$$

หรือในการคำนวณหาแรงดึงในสายเคเบิลที่แขวนระหว่างเสาไฟฟ้าแรงสูง จำเป็นต้องหารากของสมการที่อยู่ในรูปแบบ เช่น

$$f(x) = \sinh \frac{4}{9x} - \frac{5}{9x} = 0 \quad (2-7)$$

ตลอดจนการออกแบบความแข็งแรงของเสารับน้ำหนักที่ตั้งในแนวค้ำเพื่อป้องกันไม่ให้เกิดการหักในแนวแกน (buckling) จำเป็นต้องหารากของสมการที่อยู่ในรูปแบบของอนุกรมอนันต์ เช่น

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3}{8} x^{2n} - 1 = 0 \quad (2-8)$$

สมการ (2-5) จนถึง (2-8) ล้วนเป็นสมการที่เกิดจากปัญหาพื้นฐานทางด้านวิศวกรรมศาสตร์และวิทยาศาสตร์ ซึ่งสามารถจัดให้อยู่ในรูปแบบของ

$$f(x) = 0 \quad (2-9)$$

และต้องการคำนวณหาค่า  $x$  ซึ่งการหาค่า  $x$  เหล่านี้จะไม่สามารถทำได้โดยง่ายเลยหากเราไม่ทราบขั้นตอนในการคำนวณที่ถูกต้อง ดังนั้นกระบวนการขั้นตอนการหาค่า  $x$  สามารถหาได้ด้วยวิธีต่อไปนี้

- 1) ระเบียบวิธีกราฟ (Graphical Method)
- 2) ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง (Bisection Method)
- 3) ระเบียบวิธีการวางตัวผิดที่ (False-Position Method)
- 4) ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด (One-Point iteration Method)
- 5) ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson Method)
- 6) ระเบียบวิธีเซแคนต์ (Secant Method)

พบว่าระเบียบวิธีเหล่านี้ต่างประกอบด้วยขั้นตอนต่าง ๆ ที่ง่ายแก่การทำความเข้าใจ ยิ่งไปกว่านั้นขั้นตอนดังกล่าวสามารถประดิษฐ์ขึ้นเป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้โดยตรง ทำให้การหารากของสมการ (2-9) ซึ่งฟังก์ชัน  $f(x)$  อาจอยู่ในรูปแบบที่มีลักษณะซับซ้อนนั้นทำได้โดยง่าย

ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson Method) เป็นระเบียบวิธีแบบเปิดที่เริ่มจากค่าเริ่มต้นเพียงค่าเดียวและอาจนำไปสู่ผลลัพธ์ได้โดยรวดเร็ว คุณสมบัติดังกล่าวทำให้ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันเป็นที่นิยมใช้กันอย่างแพร่หลายโดยเฉพาะสำหรับงานทางปฏิบัติและได้นำมาใช้ในการทำงานวิจัยครั้งนี้ แต่ก่อนที่จะอธิบายขั้นตอนของระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันนี้ เนื่องจากระเบียบวิธีดังกล่าวตั้งอยู่บนรากฐาน

ของการใช้อนุกรมเทย์เลอร์ (Taylor series) ดังนั้น เราจะมาทำความเข้าใจกับอนุกรมเทย์เลอร์ก่อนดังต่อไปนี้

อนุกรมเทย์เลอร์เป็นอนุกรมที่ใช้ในการหาค่าฟังก์ชันที่ตำแหน่ง  $x$  จากค่าของฟังก์ชันและค่าอนุพันธ์ (derivatives) ที่มีอันดับต่าง ๆ กันของฟังก์ชันนี้ที่ตำแหน่ง  $x_0$  ซึ่งอยู่ใกล้เคียงกัน ถึงแม้ว่าอนุกรมเทย์เลอร์จะประกอบด้วยพจน์ทั้งหมดจำนวนอนันต์ พจน์แต่ความหมายของอนุกรมเทย์เลอร์สามารถทำความเข้าใจได้โดยไม่ยากนัก สมมุติว่าเราทำการประมาณอนุกรมเทย์เลอร์นี้ด้วยการใช้พจน์เพียงพจน์เดียวนั้นคือ

$$f(x) \cong f(x_0) \quad (2-10)$$

ซึ่งบางครั้งเรียกว่าเป็นการประมาณอันดับศูนย์ (zero-order approximation) สมการ (2-10) นี้ กล่าวว่าค่าของฟังก์ชันที่  $x$  และ  $x_0$  นั้นเท่ากัน ซึ่งจะถูกต้องได้ก็ต่อเมื่อฟังก์ชันนั้นเป็นค่าคงที่ (constant) เท่านั้นแต่สำหรับฟังก์ชันโดยทั่วไปสมการ(2-10) จะถูกต้องโดยประมาณเท่านั้นหากตำแหน่ง  $x$  และ  $x_0$  นั้นอยู่ใกล้เคียงกัน

หากเราใช้อนุกรมเทย์เลอร์ที่ประมาณด้วยการใช้พจน์จำนวน 2 พจน์ ดังนี้

$$f(x) \cong f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) \quad (2-11)$$

เนื่องจาก  $f(x_0)$  เป็นค่าของความชัน ดังนั้นสมการ (2-11) นี้จึงเปรียบเสมือนสมการเส้นตรงและจะให้ค่าที่ถูกต้องเสมอหากฟังก์ชันที่กำหนดให้นั้นมีการเปลี่ยนแปลงในลักษณะเชิงเส้นตรง สมการ (2-11) ดังกล่าวบางครั้งจึงเรียกว่าเป็นการประมาณอันดับหนึ่ง (first-order approximation)

ในทำนองเดียวกัน หากฟังก์ชันที่กำหนดมาให้อยู่ในรูปแบบของฟังก์ชันกำลังสอง (quadratic function) อนุกรมเทย์เลอร์ที่ประกอบด้วย 3 พจน์

$$f(x) \cong f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0) \quad (2-12)$$

จะสามารถให้ค่าที่ถูกต้องได้ ดังนั้นสำหรับฟังก์ชันโดยทั่วไปที่อยู่ในรูปแบบที่ซับซ้อน และไม่สามารถเขียนในรูปแบบของสมการพหุนาม (polynomials) ได้ อนุกรมเทย์เลอร์ที่จะใช้แทนฟังก์ชันดังกล่าวจึงจำเป็นต้องประกอบด้วยพจน์เป็นจำนวนพจน์อนันต์ นั่นคือ

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}f''(x_0) + \dots$$

$$+ \frac{(x-x_0)^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + \dots \quad (2-13)$$

พื้นฐานความเข้าใจในอนุกรมเทย์เลอร์ ได้ถูกนำมาใช้ในระเบียบวิธีของนิวตัน ราฟสัน เพื่อหารากของสมการ  $f(x) = 0$  โดยใช้การประมาณฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทย์เลอร์ที่ประกอบด้วยพจน์เพียง 2 พจน์ดังแสดงในสมการ (2-11) นั่นคือ กำหนดให้

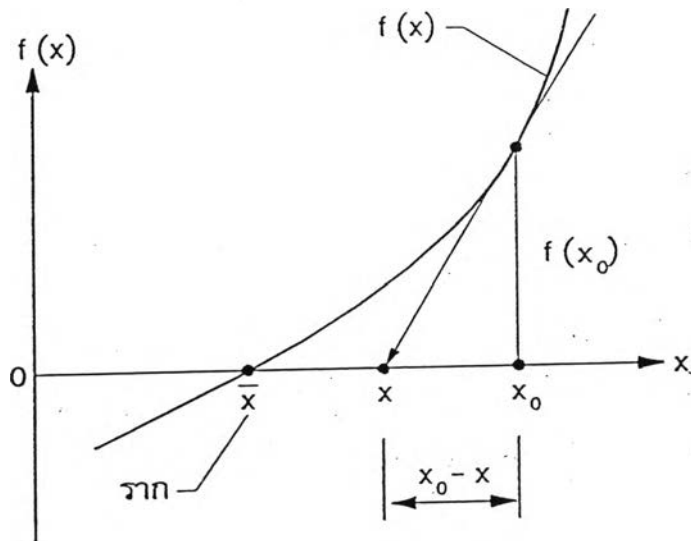
$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) = 0 \quad (2-14)$$

หรือ

$$(x-x_0)f'(x_0) = -f(x_0)$$

$$x-x_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (2-15)$$

ความหมายของสมการ (2-15) นี้สามารถอธิบายได้โดยใช้กราฟรูปที่ 2-3 ประกอบ



รูปที่ 2-3 กราฟแสดงการคำนวณหา  $x$  ใหม่จากค่ากำหนดเริ่มต้น  $x_0$  ในระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน

ที่มา: ปราโมทย์ เศษะอำไพ. ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในงานวิศวกรรม. สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, (2538): 50

หลักการของระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันเริ่มจากการกำหนดค่าเริ่มต้น  $x_0$  ดังแสดงในกราฟรูป 2-3 แล้วทำการคำนวณค่าของฟังก์ชัน  $f(x_0)$  และค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน  $f(x_0)$  ที่ตำแหน่ง  $x_0$  นั้น ค่าดังกล่าวจะนำไปแทนลงในสมการ (2-15) ก่อให้เกิดค่า  $x$  ที่ตำแหน่งใหม่ ดังแสดงในกราฟรูป 2-3 ซึ่งมีค่าเข้าใกล้ราก  $x$  มากขึ้น จากนั้นก็ใช้วิธีการทำซ้ำเพื่อหาค่า  $x$  ต่าง ๆ ที่เกิดจากวิธีการทำซ้ำนี้จะลู่อู่เข้าสู่ราก  $x$  ที่แท้จริง

จากคำอธิบายต่าง ๆ เหล่านี้ เราจะเห็นได้ว่าระเบียบวิธีการของนิวตัน-ราฟสันเป็นระเบียบวิธีการทำซ้ำซึ่งประกอบด้วยการหาค่า  $x$  ใหม่จากค่า  $x$ เก่า โดยใช้สมการ



(2-15) ที่ได้จากการประมาณของอนุกรมเทย์เลอร์ หากเรากำหนดให้  $\Delta x$  แทนความแตกต่างระหว่างค่า  $x$  ใหม่กับค่า  $x$  เก่า ดังนั้นสมการ (2-15) จึงเขียนได้ว่า

$$\Delta x = x - x_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (2-16)$$

ซึ่งสามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบที่สามารถนำไปใช้คำนวณโดยวิธีการทำซ้ำโดยประกอบด้วยขั้นตอนดังนี้คือ

ขั้นตอนที่ 1 คำนวณค่าฟังก์ชันและค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันนั้นที่ตำแหน่ง  $x$  เก่าแล้ว คำนวณค่าการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์จาก

$$\Delta x_{k+1} = -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \quad (2-17)$$

โดยตัวห้อยล่าง  $k$  และ  $k+1$  แทนการทำซ้ำครั้งที่  $k$  และ  $k+1$  ตามลำดับ

ขั้นตอนที่ 2 คำนวณหาค่าตำแหน่ง  $x$  ใหม่ จาก

$$\Delta x_{k+1} = x_k + \Delta x_{k+1} \quad (2-18)$$

ขั้นตอนที่ 3 ตรวจสอบผลลัพธ์ที่ได้นั้นลู่เข้าถึงเกณฑ์ที่กำหนดไว้แล้วหรือไม่ค่าของเกณฑ์การลู่เข้าที่ยอมรับได้ อาจอยู่ในรูปแบบใดรูปแบบหนึ่ง ดังต่อไปนี้

$$(ก) \quad |\Delta x_{k+1}| < \varepsilon_1 \quad (2-19)$$

โดย  $\varepsilon_1$  แทนค่าความผิดพลาดสัมบูรณ์ (absolute error) หรือ

$$(จ) \quad \left| \frac{\Delta x_{k+1}}{x_{k+1}} \right| < \varepsilon_2 \quad (2-20)$$

โดย  $\varepsilon_2$  แทนค่าความผิดพลาดสัมพัทธ์ (relative error)

$$(ค) \quad \left| \frac{\Delta x_{k+1}}{x_{k+1}} \right| \times 100\% < \varepsilon_3 \quad (2-21)$$

โดย  $\varepsilon_3$  แทนค่าความผิดพลาดสัมพัทธ์คิดเป็นร้อยละ (percentage relative error) เป็นต้น หากค่าของผลลัพธ์ที่ได้มีค่ายังไม่ถึงเกณฑ์การลู่เข้าที่กำหนดไว้ก็ให้ย้อนกลับไปยังขั้นตอนที่ 1 เพื่อทำซ้ำใหม่

จากที่ผ่านมาแล้วแต่แสดงระเบียบวิธีการหาค่าของสมการเพียงสมการเดียวที่อยู่ในรูปแบบของ  $f(x) = 0$  สำหรับปัญหาทางวิศวกรรมศาสตร์และวิทยาศาสตร์โดยทั่วไปในทางปฏิบัติแล้ว โดยปรกติผลลัพธ์จะเกิดจากการแก้ระบบสมการ (system of equations) ที่ประกอบด้วยสมการเป็นจำนวนมาก และเป็นระบบสมการไม่เชิงเส้น (system of nonlinear equations) ที่ประกอบด้วย  $n$  สมการ และมีตัวไม่รู้ค่า  $n$  ตัว คือ  $x_1, x_2, \dots, x_n$  นั้นสามารถเขียนในรูปแบบทั่วไปได้ดังนี้

$$\left. \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} n \text{ สมการ} \end{array} \quad (2-22)$$

ซึ่งสามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบของเมตริกซ์ได้คือ

$$\begin{array}{c} [A] \\ (n \times n) \end{array} \begin{array}{c} \{x\} \\ (n \times 1) \end{array} = \begin{array}{c} \{B\} \\ (n \times 1) \end{array}$$

โดย  $[A] = [A(x_i)]$  แทนเมทริกซ์จตุรัสที่ขึ้นอยู่กับตัวไม่รู้ค่า  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ ;  $\{X\}$  แทนเวกเตอร์หรือเมทริกซ์ที่มีเพียงหนึ่งแถวตั้งซึ่งประกอบด้วยตัวไม่รู้ค่า  $x_i$  และ  $\{B\}$  แทนเวกเตอร์ที่ประกอบด้วยตัวที่รู้ค่า

วิธีการทำซ้ำของนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson iteration) เพื่อใช้แก้ระบบสมการไม่เชิงเส้นในรูปแบบของสมการ (2-22) มีขั้นตอนเช่นเดียวกันกับที่ใช้แก้สมการไม่เชิงเส้นที่มีเพียงสมการเดียว ข้อที่แตกต่างกันก็คืออนุกรมเทย์เลอร์ที่ใช้ในการแก้ระบบสมการไม่เชิงเส้นนี้เป็นอนุกรมเทย์เลอร์สำหรับ  $n$  ตัวแปร ซึ่งสำหรับสมการที่  $i$  ใด ๆ สามารถเขียนได้ในรูปแบบดังนี้

$$f_i(x_1 + \Delta x_1, x_2 + \Delta x_2, \dots, x_n + \Delta x_n) = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x_1, x_2, \dots, x_n) \Delta x_j + \dots \quad (2-23)$$

โดยในที่นี้  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  เปรียบเสมือนค่าเริ่มต้นที่จะนำไปสู่การหาค่าผลลัพธ์ของ  $x_i + \Delta x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ซึ่งหากเราใช้แค่ 2 พจน์แรกทางด้านขวาของสมการ (2-23) นี้ และในขณะเดียวกันกำหนดค่าฟังก์ชันทางด้านซ้ายของสมการให้เท่ากับศูนย์ ผลที่ได้ก็เหมือนกับสมการ (2-14) ทุกประการ ที่จะนำไปสู่การคำนวณหาค่าการ  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ได้

$$0 = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x_1, x_2, \dots, x_n) \Delta x_j \quad (2-24)$$

$$\text{นั่นคือ} \quad \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Delta x_j = -f_i \quad (2-25)$$

ยกตัวอย่างเช่น หากเรามีระบบสมการที่ประกอบด้วย 3 สมการย่อย ดังนั้น  $n = 3$  และ  $i, j = 1, 2, 3$  ทำให้สมการ (2-25) สามารถเขียนในรูปแบบของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\begin{array}{c}
 \left[ \begin{array}{ccc}
 \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_1}{\partial x_3} \\
 \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_3} \\
 \frac{\partial f_3}{\partial x_1} & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & \frac{\partial f_3}{\partial x_3}
 \end{array} \right]
 \begin{array}{c}
 \left\{ \begin{array}{c}
 \Delta x_1 \\
 \Delta x_2 \\
 \Delta x_3
 \end{array} \right\} \\
 \{\Delta x\}
 \end{array}
 = -
 \begin{array}{c}
 \left\{ \begin{array}{c}
 f_1 \\
 f_2 \\
 f_3
 \end{array} \right\} \\
 \{f\}
 \end{array}
 \end{array}
 \quad (2-26)$$

นั่นคือ สำหรับการแก้ระบบสมการไม่เชิงเส้นที่ประกอบด้วย  $n$  สมการ วิธีการของนิวตัน-ราฟสันจะนำไปสู่สมการในรูปแบบของ

$$\underbrace{[J]}_{(n \times n)} \underbrace{\{\Delta x\}}_{(n \times 1)} = - \underbrace{\{f\}}_{(n \times 1)} \quad (2-26-1)$$

โดย  $[J]$  เรียกว่า ยาโคเบียนเมตริกซ์ (Jacobian matrix) ซึ่งสัมประสิทธิ์ (coefficients) ต่าง ๆ ของเมตริกนี้ หาได้จาก

$$J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \quad (2-26-2)$$

และ  $\{\Delta x\}$  เป็นเวกเตอร์ของการเปลี่ยนแปลงในผลลัพธ์ของราก  $x_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ที่เกิดขึ้นในการทำซ้ำแต่ละครั้ง เวกเตอร์  $\{f\}$  ประกอบด้วยฟังก์ชัน  $f_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$  ที่ขึ้นอยู่กับ  $x_i$  ต่าง ๆ และบางครั้งก็ถูกเรียกว่าเวกเตอร์ของเศษตกค้าง (residuals) เนื่องมาจากเหตุผลที่ว่าหาก  $x$  ไม่ใช่ผลลัพธ์ของระบบสมการนั้นแล้ว ฟังก์ชัน  $f_i$  ในเวกเตอร์  $\{f\}$  นี้จะมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ จนกว่า  $x_i$  จะลู่เข้าหาผลลัพธ์ที่ต้องการแล้ว ฟังก์ชัน  $f_i$  เหล่านี้จึงมีค่าเท่ากับศูนย์ ซึ่งทำให้ระบบสมการไม่เชิงเส้น (2-22) นั้นเป็นจริง

จากคำอธิบายดังกล่าวนี้ ขั้นตอนของการคำนวณเพื่อแก้ระบบสมการไม่เชิงเส้น โดยวิธีการทำซ้ำของนิวตัน-ราฟสัน ประกอบด้วยขั้นตอนดังต่อไปนี้

ขั้นตอนที่ 1 แก้ระบบสมการ

$$[J]^k \{\Delta x\}^{k+1} = -\{f\}^k \quad (2-27)$$

โดยตัวห้อยบน  $k$  แทนการทำซ้ำครั้งที่  $k$

ขั้นตอนที่ 2 คำนวณค่าผลลัพธ์ใหม่จาก

$$\{x\}^{k+1} = \{x\}^k + \{\Delta x\}^{k+1} \quad (2-28)$$

ขั้นตอนที่ 3 ตรวจสอบผลลัพธ์ที่ได้นั้นว่าได้อยู่เข้าถึงเกณฑ์ที่ตั้งไว้ดังเช่นแสดงในรูปแบบของสมการ (2-19) - (2-21) แล้วหรือไม่ หากยังไม่ถึงเกณฑ์ที่ได้ตั้งไว้ก็ให้ย้อนกลับไปยังขั้นตอนที่ 1 เพื่อการทำซ้ำใหม่