บทที่ 3
การคำนวณเชิงตัวเลข

ในปัจจุบันนี้ การคำนวณเชิงตัวเลขเข้ามามีบทบาทมากขึ้น ในการศึกษา และการวิเคราะห์ปัญหาต่างๆในงานด้านวิศวกรรม เนื่องจากการคำนวณเชิงตัวเลข เป็นวิธีที่มีขั้นตอนที่ไม่ยุ่งยากมากนัก แต่อย่างไรก็ตาม ผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณเชิงตัวเลข จะให้ผลลัพธ์ที่เป็นค่าโดยประมาณ หรือที่เรียกว่า ผลเฉลยโดยประมาณ เท่านั้น

การแก้ปัญหาของสมการ ที่แสดงไว้ในบทที่ 2 ของงานวิจัยนี้ ได้นำวิธีไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์ ซึ่งเป็นวิธีการวิเคราะห์เชิงตัวเลขวิธีหนึ่ง เข้ามาช่วยในการแก้ปัญหา และ ในขั้นตอนต่างๆในการแก้สมการจะอาศัยวิธีการเชิงตัวเลข (numerical method) อื่นๆ ซึ่งได้แก่ การหาค่าอินทิกรัลโดยการใช้กฎของซิมป์สันแบบหลายช่วง และการแก้ระบบสมการด้วยวิธีการกำจัดแบบเกาส์ (Gauss elimination method) ดังนั้นในงานวิจัยนี้จะกล่าวถึงวิธีการเชิงตัวเลขดังที่ได้กล่าวมาเท่านั้น

3.1 วิธีไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์

วิธีไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์ เป็นวิธีการวิเคราะห์เชิงตัวเลข ที่ใช้กันอย่างกว้างขวางในงานด้านวิศวกรรม เพื่อแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ ที่มีความซับซ้อนมากๆ และ ยากต่อการแก้สมการโดยวิธี analytical method โดยเฉพาะปัญหาที่มีลักษณะเป็นสมการ nonlinearities

การแก้ปัญหาทางด้านวิศวกรรม โดยอาศัยวิธีไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์ จะกระทำได้ 2 วิธีด้วยกัน คือ 1. การใช้ physical formulation ร่วมกับการดุลพลังงาน และ rate equation และ 2. การใช้ mathematical formulation กับ สมการเชิงอนุพันธ์โดยตรง ซึ่งในงานวิจัยนี้ได้เลือกใช้วิธีที่สอง

mathematical formulation ของวิธี ไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์ที่นิยมใช้ มีอยู่ด้วยกัน 3 วิธีคือ 1. Explicit method , 2. Implicit method และ 3. Crank-Nicolson method โดยในงานวิจัยนี้ ได้

เลือกใช้วิธี implicit method เนื่องจากเหตุผล 3 ประการด้วยกัน คือ 1. รูปแบบของสมการไม่ยุ่งยากมากนัก ทำให้สะดวกต่อการเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ 2. ความเที่ยงตรงของผลลัพธ์จะขึ้นอยู่กับ time step (ΔX) ซึ่งถ้ายิ่งกำหนด time step น้อยเท่าใด ความเที่ยงตรงก็ยิ่งมีค่ามากเท่านั้น และ 3. ปัญหาการแกว่งของผลลัพธ์ (numerical oscillation) จะไม่ปรากฏ ไม่ว่า time step จะมีขนาดเท่าใดก็ตาม ในขณะที่วิธีอื่นจะประสบกับปัญหาดังกล่าว ถ้า time step มีขนาดไม่เหมาะสมหรือใหญ่เกินไป

3.1.1 Implicit method เป็นวิธีที่มี mathematical formulation ดังต่อไปนี้

- อนุพันธ์อันดับหนึ่งของเวลา ($\frac{\partial T}{\partial t}$) แทนด้วย forward finite difference formulation

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t} \tag{3.1}$$

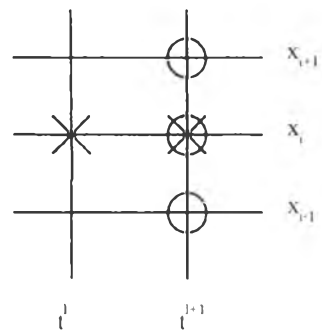
- อนุพันธ์อันดับหนึ่งของระยะทาง ($\frac{\partial T}{\partial x}$) แทนด้วย centered finite difference formulation

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{T_{i+1}^{l+1} - T_{i-1}^{l+1}}{2\Delta x} \tag{3.2}$$

- อนุพันธ์อันดับสองของระยะทาง ($\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$) แทนด้วย centered finite difference formulation

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{\Delta x^2} \tag{3.3}$$

จาก mathematic formulation สำหรับวิธี implicit method สามารถแสดงตำแหน่งของตัวแปร ใน node ที่สัมพันธ์กัน ณ ตำแหน่งของเวลา l และตำแหน่งของระยะทาง i ดังนี้



○ แทนตำแหน่งของ node ที่เกี่ยวข้องในความแตกต่างของระยะทาง

╳ แทนตำแหน่งของ node ที่เกี่ยวข้องในความแตกต่างของเวลา

รูปที่ 3.1 แสดงตำแหน่งของ node ที่เกี่ยวข้อง โดยวิธี implicit method

3.2 วิธีการกำจัดแบบเกาส์

วิธีการกำจัดแบบเกาส์ เป็นวิธีแก้ระบบสมการที่นิยมกันมากวิธีหนึ่ง ซึ่งโดยทั่วไป จะใช้ในโปรแกรมคอมพิวเตอร์ขนาดใหญ่ที่ใช้แก้ปัญหาทางด้านวิศวกรรม วิธีการกำจัดแบบเกาส์ สามารถแบ่งเป็น 2 ขั้นตอน ดังนี้

(1) การกำจัดไปข้างหน้า (forward elimination) หากมีระบบสมการที่ประกอบด้วย 3 สมการย่อยดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \qquad \text{(a)}$$

การกำจัดไปข้างหน้าจะเปลี่ยนระบบสมการ (a) ไปให้อยู่ในรูปแบบ ซึ่งเมตริกจัตุรัสทางด้านซ้ายของสมการ จะเป็นเมตริกที่ประกอบด้วยค่าศูนย์ ตลอดแถบล่างซ้ายของเมตริก ในรูปแบบดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a''_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ b''_3 \end{bmatrix} \qquad \text{(b)}$$

โดยเครื่องหมายที่เป็นดัชนีของสัมประสิทธิ์แสดงถึงว่าสัมประสิทธิ์นั้นเป็นค่าใหม่ซึ่งเปลี่ยนแปลงไปจากสัมประสิทธิ์เดิมในสมการ (a)

(2) การแทนค่าย้อนกลับ (back substitution) เมื่อจัดระบบสมการให้อยู่ในรูปแบบของสมการ (b) ได้แล้ว ก็เป็นการง่ายที่จะคำนวณหาค่า x_i โดยเริ่มจาก สมการท้ายสุดก่อน แล้วทำไล่ย้อนกลับไปเพื่อหาค่า x_i ทีละสมการ ดังนี้

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{b''_3}{a''_{33}} \\ x_2 &= \frac{b'_2 - a'_{23}.x_3}{a'_{22}} \\ x_1 &= \frac{b_1 - a_{12}.x_2 - a_{13}.x_3}{a_{11}} \end{aligned} \qquad \text{(c)}$$

จากขั้นตอนทั้งสองนี้ สามารถเขียนให้อยู่ในรูปแบบที่มาตรฐาน เพื่อสะดวกต่อการนำไปแต่งโปรแกรมคอมพิวเตอร์ สำหรับการแก้ระบบสมการโดยทั่วไปที่ประกอบด้วย n สมการย่อยได้ดังต่อไปนี้

หากพิจารณาระบบสมการที่ประกอบด้วย n สมการาย่อยในรูปแบบดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots\dots\dots\dots + a_{1n}x_n = b_1 \qquad \text{(d.1)}$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots\dots\dots\dots + a_{2n}x_n = b_2 \qquad \text{(d.2)}$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots\dots\dots\dots + a_{3n}x_n = b_3 \qquad \text{(d.3)}$$

$$\vdots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots\dots\dots\dots + a_{nn}x_n = b_n \qquad \text{(d.n)}$$

<u>การกำจัดไปข้างหน้า</u> จะเริ่มต้นจากการกำจัดไปข้างหน้า โดยเริ่มจากการหารสมการแรก (d.1) นี้ ด้วยสัมประสิทธิ์ของ x_1

$$x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 + \dots\dots\dots\dots + \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n = \frac{b_1}{a_{11}}$$

จากนั้นจึงคูณสมการที่ได้นี้ด้วยสัมประสิทธิ์ของ x_1 ของสมการที่สอง (d.2)

$$a_{21}x_1 + a_{21}\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + a_{21}\frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 + \dots\dots\dots\dots + a_{21}\frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n = a_{21}\frac{b_1}{a_{11}}$$

แล้วนำสมการที่ได้นี้ไปลบออกจากสมการ (d.2) เดิม จะได้

$$\underbrace{\left(a_{21} - a_{21}\frac{a_{12}}{a_{11}}\right)}_{a'_{21}}x_2 + \underbrace{\left(a_{23} - a_{21}\frac{a_{13}}{a_{11}}\right)}_{a'_{23}}x_3 + \dots\dots + \underbrace{\left(a_{2n} - a_{21}\frac{a_{1n}}{a_{11}}\right)}_{a'_{2n}}x_n = \underbrace{\left(b_2 - a_{21}\frac{b_1}{a_{11}}\right)}_{b'_2}$$

หรือเขียนได้ว่า

$$a'_{22}x_1 + a'_{23}x_2 + \dots\dots\dots + a'_{2n}x_n = b'_2 \qquad \text{(d.2')}$$

ทำเช่นเดียวกันนี้กับสมการ (d.3) ไปจนถึงสมการ (d.n) ทำให้สมการดั้งเดิม เปลี่ยนมาอยู่ในรูปแบบดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (e.1)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a'_{2n}x_n = b'_2 \quad (e.2)$$

$$a'_{32}x_2 + a'_{33}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a'_{3n}x_n = b'_3 \quad (e.3)$$

$$a'_{n2}x_2 + a'_{n3}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a'_{nn}x_n = b'_n \quad (e.n)$$

จะเห็นได้ว่าจากวิธีการกำจัดไปข้างหน้าหนึ่งรอบแรก ทุกๆค่าในแนวแถวตั้งแรกของระบบสมการ (e) ยกเว้นในสมการแรกนั้นต่างมีค่าเท่ากับศูนย์ ให้ทำการกำจัดไปข้างหน้าซ้ำอีกเป็นรอบที่สอง แต่คราวนี้จะเริ่มจากสมการ (e.2) ซึ่งเป็นสมการที่สอง โดยหารสมการนี้ตลอดด้วย a'_{22} แล้วคูณด้วยสัมประสิทธ์ a'_{32} ของ x_2 จากสมการ (e.3) แล้วเอาผลลัพธ์ที่ได้ไปลบออกจากสมการ (e.3) ก็จะได้สมการ (e.3) ใหม่ ที่ไม่ประกอบด้วยพจน์ x_1 และ x_2 เลย จากนั้นก็ทำเช่นนี้เรื่อยไปจนถึงสมการ (e.n) สุดท้าย กระบวนการดังกล่าว ทำให้ระบบสมการ (e) เปลี่ยนมาอยู่ในรูปแบบใหม่ ดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (f.1)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a'_{2n}x_n = b'_2 \quad (f.2)$$

$$a''_{33}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a''_{3n}x_n = b''_3 \quad (f.3)$$

$$a''_{n3}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a''_{nn}x_n = b''_n \quad (f.n)$$

จากนั้นก็ทำการกำจัดซ้ำอีกเป็นรอบที่สาม สี่ ห้า เรื่อยไปจนถึงรอบที่ n-1 ซึ่งจะก่อให้เกิดระบบสมการในรูปแบบที่พร้อมจะแทนค่าย้อนกลับเพื่อหาผลลัพธ์ดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a_{1n}x_n = b_1 \quad (g.1)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a'_{2n}x_n = b'_2 \quad (g.2)$$

$$a''_{33}x_3 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + a''_{3n}x_n = b''_3 \quad (g.3)$$

$$a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)} \quad (g.n)$$

โดยจำนวนขีดเครื่องหมายของดัชนีบนหรือค่าในวงเล็บของดัชนีบนแสดงจำนวนรอบของการกำจัดไปข้างหน้า

<u>การแทนค่าย้อนก</u>ลับ จากระบบสมการ (g) ค่า x_n สามารถคำนวณได้โดยตรงจากสมการสุดท้าย (g.n) นั่นคือ

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \tag{h.1}$$

และจากนั้นก็สามารถหาค่า $x_{n-1}, x_{n-2}, \ldots, x_2, x_1$ โดยการไล่แทนค่าย้อนกลับไปทีละสมการ โดยใช้ความสัมพันธ์คือ

$$x_i = \frac{b_i^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} x_j}{a_{ii}^{(i-1)}} \tag{h.2}$$

โดยดัชนีล่าง i แทนสมการอันดับที่ในระบบสมการ (f)

จากลำดับขั้นตอนที่กล่าวมาทั้งหมดข้างต้น สามารถที่จะนำมาใช้ในการแก้ปัญหาระบบสมการสำหรับงานวิจัยนี้ แต่สิ่งที่ได้สังเกตพบคือ ระบบสมการที่ได้มีลักษณะพิเศษที่เรียกว่า tridiagonal system ซึ่งลักษณะดังกล่าว จะทำให้การนำวิธีการกำจัดแบบเกาส์มาใช้ในการแก้ปัญหาไม่ยุ่งยากมากนัก และสามารถเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ในส่วนของการแก้ระบบสมการได้อย่างสั้นๆ โดยจะแสดงไว้เป็นภาษาเทียม (pseudocode) ไว้ดังรูปที่ 3.2

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & & & & \\ c_2 & f_2 & g_2 & & & \\ & c_3 & f_3 & g_3 & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & c_{n-1} & f_{n-1} & g_{n-1} \\ & & & & c_n & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{n-1} \\ r_n \end{bmatrix}$$

(a) decomposition

```
DOFOR k = 2 to n
    e_k = e_k/f_{k-1}
    f_k = f_k - e_k*g_{k-1}
ENDDO
```

(b) forward substitution

```
DOFOR k = 2 to n
    r_k = r_k - e_k*r_{k-1}
ENDDO
```

(c) back substitution

```
x_n = r_n/f_n
DOFOR k = n-1 to 1 step -1
    x_k = ( r_k - g_k*x_{k-1})/f_k
ENDDO
```

รูปที่ 3.2 ภาษาเทียม (psudocode) ตามวิธีการกำจัดแบบเกาส์ สำหรับระบบสมการที่มีลักษณะเป็น tridiagonal system

3.3 วิธีการหาค่าอินทิกรัล โดยการใช้กฎซิมป์สันแบบหลายช่วง

การหาค่าอินทิกรัล โดยการใช้กฎซิมป์สันแบบหลายช่วง จะใช้เพื่อหาค่า bulk mean temperature ซึ่งอยู่ในรูปอินทิกรัล ตามสมการ (2.56) และสมการ (2.57) โดยวิธีดังกล่าวจะให้ผลลัพธ์ที่มีความเที่ยงตรงสูง

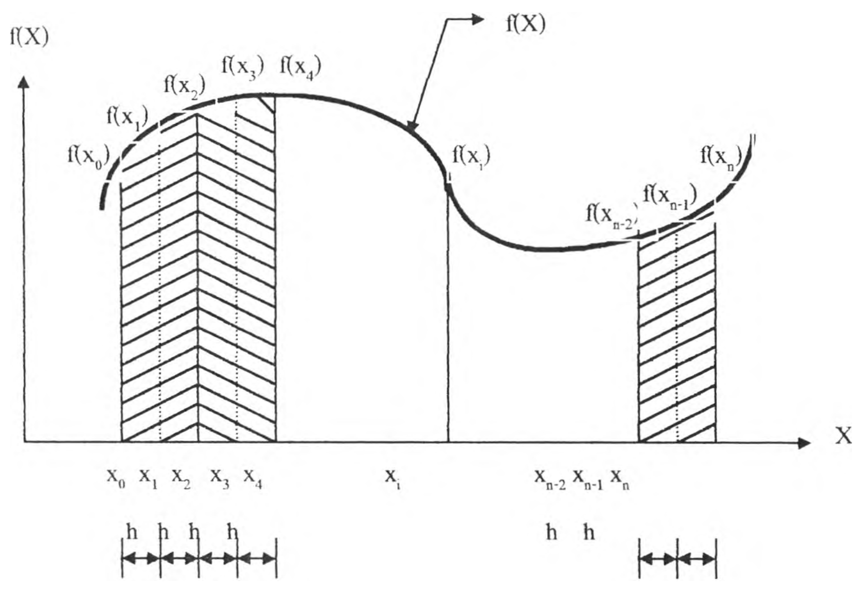
การหาค่าอินทิกรัล โดยการใช้กฎของซิมป์สันแบบหลายช่วง จะแบ่งช่วงของการหาค่าอินทิกรัลออกเป็นช่วงย่อยๆ n ช่วง ซึ่งหลักการของวิธีดังกล่าวสามารถทำความเข้าใจได้โดยง่ายจากการพิจารณารูปที่ 3.3

รูปที่ 3.3 แสดงลักษณะการกระจายของฟังก์ชัน f(x) ใดๆในช่วง $a \le x \le b$ โดยจะแบ่งช่วงจาก a ถึง b นี้ออกเป็น n ช่วงย่อย ดังนั้นความกว้างของ h ของแต่ละช่วงย่อยคือ

$$h = \frac{b-a}{n} \qquad \text{(i)}$$

โดยโคออร์ดิเนตที่จุดปลายทั้งสองของแต่ละช่วง คือ

$$x_i = x_0 + ih \qquad i = 0,1,2........,n \qquad (j)$$



รูปที่ 3.3 การประมาณค่าอินทิกรัล โดยการใช้กฎของซิมป์สันแบบหลายช่วง

จากการหาค่าอินทิกรัลของฟังก์ชัน f(x) ที่กำหนดให้ในช่วง $a \le x \le b$ นั่นคือ

$$I = \int_a^b f(x)dx \qquad (k)$$

จากนั้น จะแบ่งการหาค่าอินทิกรัลนี้ออกเป็น n/2 ช่วง โดยเริ่มจากช่วง $x_0 \le x \le x_2$, $x_2 \le x \le x_4$, เรื่อยไปจนถึงช่วง $x_{n-2} \le x \le x_n$,ดังนี้

$$I = \int_{X_0}^{X_2} f(X)dX + \int_{X_2}^{X_4} f(X)dX + \int_{X_4}^{X_6} f(X)dX + ... \int_{X_{n-2}}^{X_n} f(X)dX \qquad (l)$$

โดยแทนแต่ละเทอมด้วยค่าอินทิกรัลจากกฎของซิมป์สัน ดังนี้

$$I \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right]+\frac{h}{3}\left[f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)\right]$$
$$+\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots+\frac{h}{3}\left[f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)\right]$$

$$=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+\ldots\ldots\ldots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)\right]$$

$$I = h\frac{f(X_0)+4\sum_{i=1,3,5}^{n-1} f(X_i)+2\sum_{j=2,4,6}^{n-2} f(X_j)+f(X_n)}{3} \qquad \text{(m)}$$

เนื่องจากการประยุกต์กฎของซิมป์สันจำนวน n/2 ครั้งลงบนช่วงของการอินทิเกรตทั้งหมด n/2 ช่วง ดังนั้น ข้อจำกัดของวิธีนี้ก็คือ จำนวนช่วงย่อย n ที่กำหนดให้นั้นต้องเป็นเลขคู่