บทที่ 3

การคำนวณเชิงตัวเลข

ในการแก้ปัญหาของสมการที่แสดงไว้ในบทที่ 2 ได้นำวิธีของไฟไนท์ดิฟเฟอเรนซ์ (Finite Difference) ซึ่งเป็นวิธีการวิเคราะห์เชิงตัวเลขวิธีหนึ่ง เข้ามาช่วยในการแก้ปัญหา โดยในที่นี้จะกล่าวถึงเฉพาะส่วนของวิธีการเชิงตัวเลข (Numerical Method) ที่นำมาใช้ในการคำนวณเท่านั้น คือ

3.1 <u>พื้นฐานของวิธีไฟไนท์ ดิฟเฟอร์เรนซ์</u> (Finite Difference)

เป็นการประมาณค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชัน ถ้าฟังก์ชันหาอนุพันธ์ได้ที่จุด x_i สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของอนุกรมเทเลอร์ได้ดังนี้

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)}{1!} + \frac{f''(x_i)(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} + \ldots$$

เมื่อเขียนอยู่ในรูปอนุพันธ์เชิงตัวเลขจะได้

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$ Forward Difference

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2(x_{i+1} - x_i)}$$ Central Difference

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2}$$ Forward Difference

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{(x_{i+1} - x_i)^2}$$ Central Difference

เมื่อนำมาประยุกต์ใช้กับค่าตัวแปรต่างๆในสมการจะได้

$$\frac{\partial u_{m,n}}{\partial x} = \frac{u_{m+1,n} - u_{m-1,n}}{2\Delta x} \qquad \frac{\partial v_{m,n}}{\partial x} = \frac{v_{m+1,n} - v_{m-1,n}}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial u_{m,n}}{\partial y} = \frac{u_{m,n+1} - u_{m,n-1}}{2\Delta y} \qquad \frac{\partial v_{m,n}}{\partial y} = \frac{v_{m,n+1} - v_{m,n-1}}{2\Delta y}$$

$$\frac{\partial T_{m,n}}{\partial x} = \frac{T_{m+1,n} - T_{m-1,n}}{2\Delta x} \qquad \frac{\partial T_{m,n}}{\partial y} = \frac{T_{m,n+1} - T_{m,n-1}}{2\Delta y}$$

$$\frac{\partial^2 u_{m,n}}{\partial x^2} = \frac{u_{m+1,n} - 2u_{m,n} + u_{m-1,n}}{\Delta x^2} \qquad \frac{\partial^2 v_{m,n}}{\partial x^2} = \frac{v_{m+1,n} - 2v_{m,n} + v_{m-1,n}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 u_{m,n}}{\partial y^2} = \frac{u_{m,n+1} - 2u_{m,n} + u_{m,n-1}}{\Delta y^2} \qquad \frac{\partial^2 v_{m,n}}{\partial y^2} = \frac{v_{m,n+1} - 2v_{m,n} + v_{m,n-1}}{\Delta y^2}$$

$$\frac{\partial^2 T_{m,n}}{\partial x^2} = \frac{T_{m+1,n} - 2T_{m,n} + T_{m-1,n}}{\Delta x^2} \qquad \frac{\partial^2 T_{m,n}}{\partial y^2} = \frac{T_{m,n+1} - 2T_{m,n} + T_{m,n-1}}{\Delta y^2}$$

3.1.1 วิธีเอ็กพริซิท (Explicit Methods)

วิธีเอ็กพริซิทเป็นวิธีการประมาณอนุพันธ์อันดับสองต่อระยะระหว่างโหนดและอนุพันธ์อันดับหนึ่งต่อเวลาซึ่งมีรูปแบบในทางไฟไนท์ดิฟเฟอร์เรนท์ในการแก้ปัญหาโดยอนุพันธ์อันดับสองจะใช้วิธีแบบ Centered Finite Divided Difference แทน คือ

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T^l_{m+1} - 2T^l_{m} + T^l_{m-1}}{\Delta x^2}$$

ตัวอักษรที่อยู่ด้านบนแทนเวลา และ ตัวอักษรด้านล่างแทนระยะระหว่างตำแหน่ง

ในการประมาณอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่ขึ้นกับเวลาเขียนในรูป Forward Finite Diveded Difference เช่น

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T^{l+1}_{m} - T^l_{m}}{\Delta t}$$

3.2 <u>วิธีการทำซ้ำโดยตรง</u> (Direct Iteration)

วิธีการทำซ้ำโดยตรง (Direct Iteration) เป็นวิธีหนึ่งที่ใช้สำหรับแก้ระบบสมการไม่เป็นเชิงเส้น โดยรูปแบบของระบบสมการไม่เป็นเชิงเส้น (System of Nonlinear Equations) ที่ประกอบด้วย n สมการ และตัวไม่ทราบค่า n ตัว คือ $x_1, x_2, x_3, \ldots\ldots, x_n$ นั้น สามารถเขียนในรูปแบบสมการได้ดังนี้

$$
\begin{aligned}
f_1(x_1, x_2, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n) &= 0 \\
f_2(x_1, x_2, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n) &= 0 \\
f_3(x_1, x_2, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n) &= 0 \\
\vdots \qquad & \quad \vdots \\
f_n(x_1, x_2, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n) &= 0
\end{aligned}
$$

จากสมการไม่เป็นเชิงเส้นสามารถนำมาเขียนระบบสมการใหม่ให้อยู่ในรูปแบบของวิธีการทำซ้ำได้ดังนี้

$$
\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= g_1(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n^k) \\
x_2^{k+1} &= g_2(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n^k) \\
x_3^{k+1} &= g_3(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n^k) \\
\vdots \quad & \qquad \vdots \\
x_n^{k+1} &= g_n(x_1^k, x_2^k, x_3^k, \ldots\ldots\ldots\ldots, x_n^k)
\end{aligned}
$$

โดยครรชนีบน k แทนการทำซ้ำครั้งที่ k ดังนั้น ขั้นตอนการคำนวณโดยวิธีการทำซ้ำโดยตรงนี้จะมีขั้นตอนดังนี้

3.2.1 กำหนดค่าเริ่มต้นในการคำนวณ x_i^k โดยที่ i= 1,2,3,...,n

3.2.2 คำนวณหาค่าของ x_i^{k+1} โดยที่ i= 1,2,3,...,n จากสมการในรูปแบบของวิธีการทำซ้ำ

3.2.3 ตรวจสอบผลลัพธ์ทุกๆค่าของ x_i ที่ได้จากการคำนวณว่ามีค่าของคำตอบลู่เข้าหาเกณฑ์ที่กำหนดไว้แล้วหรือไม่เช่น

$$\left|\frac{x_i^{k+1} - x_i^k}{x_i^{k+1}}\right| x\,100\% \quad < \varepsilon$$

หากค่าผลลัพธ์ลู่เข้ายังไม่ถึงเกณฑ์ที่กำหนดไว้ก็ให้ย้อนกลับไปยังขั้นตอนที่ 2 เพื่อการทำซ้ำใหม่จนกระทั่งค่าผลลัพธ์ลู่เข้าถึงเกณฑ์ที่ต้องการ

3.3 <u>วิธีการกำจัดแบบเกาส์</u> (Gauss Elimination Method)

วิธีการกำจัดแบบเกาส์เป็นวิธีหนึ่งที่นำมาใช้ในการแก้สมการเชิงเส้น โดยรูปแบบของสมการเชิงเส้นที่ประกอบไปด้วยสมการ n สมการ และตัวแปร n ตัว สามารถเขียนอยู่ในรูปแบบของสมการโดยทั่วไปดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots + a_{1n}\,x_n \qquad = c_1 \qquad (a)$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots\ldots + a_{2n}\,x_n \qquad = c_2 \qquad (\mathrm{b})$$

$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \ldots\ldots + a_{3n}\,x_n \qquad = c_3 \qquad (c)$$

$$a_{n\,1}x_1 + a_{n\,2}x_2 + a_{n\,3}x_3 + \ldots\ldots + a_{n\,n}\,x_n \qquad = c_n \qquad (n)$$

เมื่อ a เป็นสัมประสิทธิ์ค่าคงที่ของตัวแปร

c เป็นค่าคงที่

โดยหลักการคือการกำจัดตัวไม่ทราบค่าแบบเดินหน้า (Forward Elimination of Unknowns)

โดยขั้นตอนแรกกำจัดตัวไม่ทราบค่าตัวแรก x_1 ตั้งแต่สมการ (b) ลงไปจนถึงสมการ (n) โดยนำค่าสัมประสิทธิ์ของ x_1 ในสมการ (a) หารสมการ (a) จะได้สมการดังนี้

$$x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 + \ldots\ldots + \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n = \frac{c_1}{a_{11}}$$

จากนั้นจึงคูณสมการที่ได้นี้ด้วยสัมประสิทธิ์ของ x_1 ของสมการที่ (b) จะได้สมการเป็น

$$a_{21}x_1 + a_{21}\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + a_{21}\frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 + \ldots\ldots + a_{21}\frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n = a_{21}\frac{c_1}{a_{11}}$$

นำสมการที่ได้ไปลบกับสมการ (b) จะได้

$$\left(a_{22}-a_{21}\frac{a_{12}}{a_{11}}\right)x_2+\left(a_{23}-a_{21}\frac{a_{13}}{a_{11}}\right)x_3+........+\left(a_{2n}-a_{21}\frac{a_{1n}}{a_{11}}\right)x_n=c_2-a_{21}\frac{c_1}{a_{11}}$$

หรือ

$$a'_{22}x_2+a'_{23}x_3+......+a'_{2n}\,x_n=c'_2$$

ซึ่งเครื่องหมาย prime แสดงว่า แต่ละค่าสัมประสิทธิ์ได้เปลี่ยนแปลงไปจากเดิม

ขั้นตอนต่อมากำจัด x_1 ในสมการต่อไป โดยนำ a_{31}/a_{11} คูณสมการ (a) แล้วนำไปลบกับสมการที่ c ทำซ้ำโดยเปลี่ยนสมการลงมาเรื่อยๆ แต่ใช้เทียบกับสมการ a เสมอ และทำแบบนี้จนถึงสมการที่ n จะได้ระบบสมการอยู่ในรูปแบบดังนี้

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3+......+a_{1n}\,x_n=c_1 \qquad (1a)$$

$$a'_{22}x_2+a'_{23}x_3+......+a'_{2n}\,x_n=c'_2 \qquad (1b)$$

$$a'_{32}x_2+a'_{33}x_3+......+a'_{3n}\,x_n=c'_3 \qquad (1c)$$

$$a'_{n\,2}x_2+a'_{n\,3}x_3+.....+a'_{n\,n}\,x_n=c'_n \qquad (1n)$$

ขั้นต่อมาจะทำการกำจัดซ้ำรอบที่สอง โดยเริ่มจากสมการที่สอง (1b) โดยกำจัดเทอมตัวแปร x_2 โดยคูณสมการ (1b) ด้วย a'_{32}/a'_{22} แล้วไปลบกับสมการ (1c) และทำอย่างนี้ไปเรื่อยๆจนถึงสมการ (1n) จะได้ระบบสมการเป็น

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3+......+a_{1n}\,x_n=c_1 \qquad (2a)$$

$$a'_{22}x_2+a'_{23}x_3+......+a'_{2n}\,x_n=c'_2 \qquad (2b)$$

$$a''_{33}x_3+......+a''_{3n}\,x_n=c''_3 \qquad (2c)$$

$$a''_{n\,3}x_3+......+a''_{n\,n}\,x_n=c''_n \qquad (2n)$$

ขั้นตอนต่อมาทำลักษณะเดิมโดยกำจัดทีละเทอมจนถึงรอบที่ (n-1) ซึ่งจะทำให้เกิดสมการในรูปแบบพร้อมที่จะแทนค่าหาคำตอบได้ โดยจะมีสมการลักษณะดังนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots\ldots + a_{1n}\,x_n \qquad = c_1 \qquad (3a)$$

$$a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + \ldots\ldots + a'_{2n}\,x_n \qquad = c'_2 \qquad (3b)$$

$$a''_{33}x_3 + \ldots\ldots + a''_{3n}\,x_n \qquad = c''_3 \qquad (3c)$$

$$a_{nn}^{(n-1)}x_n \qquad = c_n^{(n-1)} \qquad (3n)$$

เมื่อได้สมการนี้แล้วก็สามารถหาค่า x_n ได้ก่อนเท่ากับ $c^{(n-1)}{}_n/a^{(n-1)}{}_{nn}$ แล้วทำย้อนกลับไปหา x_{n-1} และค่าอื่นๆตามลำดับ

จากขั้นตอนดังกล่าวสามารถสรุปวิธีการกำจัดแบบเกาส์มีวิธีการ 2 ขั้นตอน คือ

3.3.1 การกำจัดแบบเดินหน้า (forward elimination) โดยสามารถเขียนอธิบายในรูปเมตริกซ์ที่ประกอบไปด้วยสมการ 3 สมการ ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix}$$

การกำจัดแบบเกาส์จะเปลี่ยนระบบสมการไปอยู่ในรูปของเมตริกซ์ที่มีค่าที่แถบล่างด้านซ้ายมีค่าเป็นศูนย์ ในรูปแบบดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a''_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c'_2 \\ c''_3 \end{bmatrix}$$

3.3.2 การแทนค่าย้อนกลับ (Back Substitution) เมื่อสมการถูกกำจัดตัวแปรโดยวิธีกำจัดแบบเกาส์แล้ว สามารถหาค่า x_i ได้โดยเริ่มจากสมการสุดท้ายก่อน แล้วแทนค่าย้อนกลับขึ้นไปเพื่อหาค่า x_i ของแต่ละสมการ ดังนี้

$$x_3 = c_3'' / a_{33}''$$
$$x_2 = (c_2' - a_{23}' x_3) / a_{22}'$$
$$x_1 = (c_1 - a_{12} x_2 - a_{13} x_3) / a_{11}$$

หรือสามารถแสดงอยู่ในรูปสมการดังนี้

$$x_i = \frac{c_i^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j}^{(i-1)} x_j}{a_{ii}^{(i-1)}}$$

โดยที่ i แทนสมการอันดับที่ในระบบสมการ $i = n-1, n-2, \ldots, 1$