เอกสารประกอบคำสอนวิชา

วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี

ChE371 applied mathematics for chemical engineer

ผศ.ดร.สิทธินันท์ ท่อแก้ว

อาจารย์ประจำภาควิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ

คำนำ

เอกสารคำสอนวิชาวศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี หรือ ChE371 applied mathematics for chemical engineer เป็นวิชาบังคับในหลักสูตรวิศวกรรมศาสตร์บัณฑิต สาขาวิศวกรรมเคมี ซึ่งเป็นวิชา 3 หน่วยกิต รายวิชานี้มีเนื้อหาที่เกี่ยวกับการประยุกต์วิธีการต่างๆ เพื่อประมาณค่าหาผลเฉลยของปัญหาทางวิศวกรรมเคมี โดยมีเนื้อหาดังต่อไปนี้

บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข

บทที่ 2 การหารากของสมการ

บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต

บทที่ 5 การถดถอยเชิงเส้น

บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง

บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล

บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า

บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

ผู้เขียนได้จัดทำเอกสารคำสอนนี้ขึ้นมาในเพื่อให้นิสิตได้ใช้ประกอบการเรียนในวิชาดังกล่าว เนื้อหาทั้งหมดในเล่ม รูปภาพประกอบ และโจทย์ ผู้เขียนนำมาจากหนังสือ Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition) ที่แต่งโดย Steven C. Chapra ของสำนักพิมพ์ McGraw-Hill Education ปี

สิทธินันท์ ท่อแก้ว
คณะวิศวกรรมศาสตร์
มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
สิงหาคม 2563

กิตติกรรมประกาศ

ผู้เขียนขอขอบคุณบุคคลดังต่อไปนี้ นายธนวันต์ แดงศิริ นางสาวปัณฑิกา จงเทพ นางสาวพัณณ์ชิตา พีรภัทร์ธานีกุล นางสาวพิมพ์มาดา อรน้อม นางสาวพิมพ์รพัชร์ พรมป้อ นางสาวภัทรพร สุมารส นางสาว วรัญญา ปากหวาน นางสาววันนิสา พลชัย นายศักริน เพชรศรี และนายสมพงศ์ แซ่เต็น ที่ได้ช่วยในการจัดทำ เอกสารคำสอนในวิชานี้ ผู้เขียนของขอบคุณรองศาสตราจารย์ธีรภัทร หลิ่มบุญเรือง และผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ภาคภูมิ ศรีรมรีน ที่ได้ให้คำปรึกษาและคำนะนำที่ดีในการจัดทำเอกสารคำสอนนี้ ตลอดจนคณาอาจารย์และเจ้าหน้าที่ประจำภาควิชาวิศวกรรมเคมีที่ได้ช่วยในการจัดทำให้เอกสารประกอบคำสอนนี้จนสำเร็จลุล่วง มา ณ ที่นี้

สารบัญ

คำนำ i

กิตติกรรมประกาศ ii

สารบัญ iii

มคอ.3 รายวิชา วศค371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี vii

บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลขแผนการสอน 12

บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข 13

1.1 บทนำ 13

1.2 ความคลาดเคลื่อน 13

1.3 ความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษ 16

1.4 ความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลายของอนุกรมเทเลอร์ 17

1.5 แบบฝึกหัด 23

1.6 บรรณานุกรม 24

บทที่ 2 การหารากของสมการ 25

บทที่ 2 การหารากของสมการ 26

2.1 บทนำ 26

2.6 ระเบียบวิธีซีแคน 44

2.7 แบบฝึกหัด 50

2.8 บรรณานุกรม 53

บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด 54

บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด ..... Error! Bookmark not defined.

3.1 บทนำ 55

3.2 วิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ 55

3.3 วิธีการประมาณค่ากำลังสอง 60

3.4 วิธีนิวตัน 62

3.5 แบบฝึกหัด 63

3.6 บรรณานุกรม 65

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต 66

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต ..... Error! Bookmark not defined.

4.1 บทนำ 69
4.2 ความรู้เบื้องต้นของเมตริกซ์....................70
4.3 การแปลงระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปเมตริกซ์....................72
4.4 การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ....................77
4.5 การหาผลเฉลยด้วยวิธีกฎของคราเมอร์ 78
4.6 ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์....................84
4.5 การหาคำตอบสำหรับเมตริกซ์แถบ....................89
4.6 การแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU 93
4.7 การแก้ปัญหาโดยการทำซ้ำ....................98
4.8 ระบบสมการไม่เชิงเส้น....................102
4.9 แบบฝึกหัด 112
4.10 บรรณานุกรม....................116
บทที่ 5 การถดถอยเชิงเส้น....................117
บทที่ 5 การถดถอยเชิงเส้น ....Error! Bookmark not defined.
5.1 บทนำ 119
5.2 ความรู้เบื้องต้นทางสถิติ 119
5.3 การถดถอยกำลังสองเชิงเส้น 121
5.4 การเปลี่ยนสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้น 124
5.4.1 สมการเอกซ์โพเนเชียล....................125
5.4.2 สมการกำลัง....................125
5.4.3 สมการอัตราเพิ่มแล้วเข้าสู่จุดอิ่มตัว 125
5.5 การถดถอยแบบพหุนาม 137
5.6 การถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณ 140
5.7 การถดถอยไม่เชิงเส้น 144
5.8 แบบฝึกหัด 148
5.9 บรรณานุกรม....................151
บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง....................152
บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง....................154
6.1 บทนำ 154

6.2 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนาม....155
6.3 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของนิวตัน....156
6.4 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของลากรานจ์....162
6.5 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline....166
6.6 การบ้าน....176
6.7 บรรณานุกรม....177
บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล....178
บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล....179
7.1 บทนำ....179
7.2 การหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู....180
7.5 การหาค่าอินทิกรัลสองชั้น....195
7.6 แบบฝึกหัด....201
7.7 บรรณานุกรม....203
บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า....204
บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า....Error! Bookmark not defined.
8.1 บทนำ....206
8.2 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าเริ่มต้น....206
8.3 การหาผลเฉลยของปัญหาในระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ....229
8.4 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าขอบด้วยวิธียิงเป้า....235
8.5 แบบฝึกหัดท้ายบท....242
8.6 บรรณานุกรม....244
บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด....245
บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด....247
9.1 บทนำ....247
9.2 การหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ....247
9.3 ระเบียบวิธีผลต่างจำกัด....254
9.3.2 ปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์ไม่เชิงเส้น....262
9.4 การแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยวิธีผลต่างจำกัด....265
9.5 แบบฝึกหัด....275

9.6 บรรณานุกรม......277

มคอ.3 รายวิชา วศค371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี

1. รหัสและชื่อวิชา

วศค371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี

ChE371 applied mathematics for chemical engineer

2. จำนวนหน่วยกิต

3 หน่วยกิต (3-0-6)

3. หลักสูตรและประเภทของรายวิชา

หลักสูตรวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี กลุ่มวิชาเอกบังคับ

4. รายวิชาที่ต้องเรียนมาก่อน (Per-requisite)

วศค 271

5. รายวิชาที่ต้องเรียนพร้อมกัน (Co-requisite)

ไม่มี

6. **จุดมุ่งหมายของรายวิชา**

1. เพื่อให้นิสิตสามารถการประมาณผลเฉลยของสมการไม่เชิงเส้น
2. เพื่อให้นิสิตสามารถระบบสมการเชิงเส้นระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเจาะจงของเมตริกซ์
3. เพื่อให้นิสิตใช้วิธีทำซ้ำการประมาณค่าฟังก์ชั่นได้
4. เพื่อให้นิสิตสามารถหาอนุพันธ์เชิงตัวเลข การหาปริพันธ์เชิงตัวเลขได้
5. เพื่อให้นิสิตสามารถใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง ปัญหาค่าขอบชนิดสองจุด และการประยุกต์ใช้งานวิศวกรรมต่าง ๆ ได้

7. คำอธิบายรายวิชา

การประมาณผลเฉลยของสมการไม่เชิงเส้น ระบบสมการเชิงเส้นระบบสมการเชิงเส้นโดยวิธีทำซ้ำการประมาณค่าฟังก์ชั่น การหาอนุพันธ์เชิงตัวเลข การหาปริพันธ์เชิงตัวเลข การประมาณค่า การเจาะจงของเมตริกซ์ ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข สำหรับสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง ปัญหาค่าขอบชนิดสองจุด การประยุกต์ใช้งานวิศวกรรมเคมี

8. จำนวนชั่วโมงที่ใช้ต่อภาคการศึกษา

ลำดับ	บรรยาย	สอนเสริม	การฝึกปฏิบัติ/งานภาคสนาม/การฝึกงาน	การศึกษาด้วยตัวเอง
1	45.00	0.00	0.00	45.00

9. รายละเอียดการพัฒนาผลการเรียนรู้ของนิสิต

1. คุณธรรมจริยธรรม

ลำดับ	หลัก/รอง	คุณธรรมจริยธรรมที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล
1	หลัก	เข้าใจและซาบซึ้งในวัฒนธรรมไทย ตระหนักในคุณค่าของระบบคุณธรรม จริยธรรม เสียสละและซื่อสัตย์สุจริต	บรรยาย	การส่งงาน

2. ความรู้

ลำดับ	หลัก/รอง	ความรู้ที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล
1	หลัก	สามารถใช้ความรู้และทักษะในสาขาวิชาของตน ในการประยุกต์แก้ไขปัญหาในงานจริงได้	บรรยาย	การสอบ

3. ทักษะทางปัญญา

ลำดับ	หลัก/รอง	ทักษะทางปัญญาที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล
1	หลัก	สามารถสืบค้นข้อมูลและแสวงหาความรู้เพิ่มเติมได้ด้วยตนเอง เพื่อการเรียนรู้ตลอดชีวิต และทันต่อการเปลี่ยนแปลงทางองค์ความรู้และเทคโนโลยีใหม่ๆ	บรรยาย	การทำรายงาน

4. ทักษะความสัมพันธ์ระหว่างบุคคลและความรับผิดชอบ

ลำดับ	หลัก/รอง	ทักษะความสัมพันธ์ระหว่างบุคคลและความรับผิดชอบที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล
1	หลัก	สามารถเป็นผู้ริเริ่มแสดงประเด็นในการแก้ไขสถานการณ์เชิงสร้างสรรค์ทั้งส่วนตัวและส่วนรวมพร้อมทั้งแสดงจุดยืนอย่างพอเหมาะทั้งของตนเองและของกลุ่ม รวมทั้งให้ความช่วยเหลือและอำนวยความสะดวกในการแก้ไขปัญหาสถานการณ์ต่างๆ	บรรยาย	การทำรายงาน

5. ทักษะการวิเคราะห์เชิงตัวเลข การสื่อสารและการใช้เทคโนโลยีสารสนเทศ

ลำดับ	หลัก/รอง	ทักษะการวิเคราะห์เชิงตัวเลข การสื่อสารและการใช้เทคโนโลยีสารสนเทศที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล

1	หลัก	มีทักษะในการวิเคราะห์ข้อมูลสารสนเทศทางคณิตศาสตร์ หรือการแสดงสถิติประยุกต์ ต่อการแก้ปัญหาที่เกี่ยวข้องได้อย่างสร้างสรรค์	ฝึก ปฏิบัติ	การสอบ

6. สมรรถนะของหลักสูตร

ลำดับ	หลัก/รอง	สมรรถนะของหลักสูตรที่ต้องพัฒนา	วิธีการสอน	วิธีการประเมินผล
1	หลัก	มีทักษะในการประยุกต์ใช้อุปกรณ์ในการแก้ปัญหาเฉพาะทางวิศวกรรมเคมี	ฝึกปฏิบัติ	การสอบ

10. แผนการสอน

สัปดาห์ที่	หัวข้อ/รายละเอียด	วิธีการสอน	สื่อการสอน
1	อธิบายรายวิชา บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
2	บทที่ 2 การหารากของสมการ หัวข้อ	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
3	บทที่ 2 การหารากของสมการ หัวข้อ	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
4	บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
5	บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
6	บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
7	บทที่ 5 การหาสมการการถดถอยเชิงเส้น	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
8	บทที่ 5 การหาสมการการถดถอยเชิงเส้น บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย

สัปดาห์ที่	หัวข้อ/รายละเอียด	วิธีการสอน	สื่อการสอน
9	บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
10	บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
11	บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
12	บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
13	บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด ครั้งที่ 1	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
14	บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด ครั้งที่ 1	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย
15	การนำเสนอในหัวข้อการประยุกต์ใช้วิธีการแก้ปัญหาในวิชาต่างๆ ที่ได้เรียนไป กรณีศึกษา	การบรรยายแบบมีปฏิสัมพันธ์กับผู้เรียน	เอกสารประกอบการบรรยาย

11. แผนการประเมินผลการเรียนรู้

กิจกรรม	ผลการเรียนรู้	วิธีการประเมิน	สัดส่วนการประเมินผล
การเข้าห้อง	คุณธรรมจริยธรรม	การเข้าห้อง	5
การสอบ	ความรู้	การสอบ	60
การสอบ	ทักษะทางปัญญา	การสอบ	10
รายงาน	ทักษะความสัมพันธ์ระหว่างบุคคลและความรับผิดชอบ	รายงาน	10
รายงาน	ทักษะการวิเคราะห์เชิงตัวเลข การสื่อสารและการใช้เทคโนโลยีสารสนเทศ	รายงาน	5
การสอบ	สมรรถนะของหลักสูตร	การสอบ	10

10. ตำราและเอกสาร

1. เอกสารประกอบคำสอน CHE371 รายวิชา คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี (APPLIED MATHEMATICS FOR CHEMICAL ENGINEER)

2 . Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

3 . Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 1

หัวข้อการสอน

อธิบายรายวิชา และ บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตได้เข้าใจในรายวิชา ความสำคัญ และการให้คะแนน
2. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจความหมายความคลาดเคลื่อนแบบต่างๆ และวิธีการหาค่าความคลาดเคลื่อน

เนื้อหา

1. อธิบายเกี่ยวกับรายวิชาและความสำคัญ
2. บทนำเกี่ยวกับความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข

3 ความคลาดเคลื่อน

4 ความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษ

5 ความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลายของอนุกรมเทเลอร์

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 1 ความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับการคำนวณเชิงตัวเลข

1.1 บทนำ

ในงานศึกษาหรือการออกแบบทางวิศกรรมจำเป็นต้องมีการคำนวณ ซึ่งบางครั้งสมการในการออกแบบทางวิศวกรรมมีความสลับซับซ้อนดังเช่น

แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการฟื้นฟูตัวเร่งปฏิกิริยา Cr-Mg ในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดคงที่ (S.I. Reshetnikov,R.V. Petrov,S.V. Zazhigalov,A.N. Zagoruiko, Mathematical modeling of regeneration of coked Cr-Mg catalyst in fixed bed reactors, Chemical Engineering Journal, 2020, 122374) ซึ่งได้เสนอแบบจำลองของการเกิดปฏิกิริยาและการแพร่ที่เกิดขึ้นในเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยาทรงกลมดังต่อไปนี้

ความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจน ดังสมการ (1-1)

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_{O2}^p}{\partial t} = D_{eff}\left(\frac{\partial^2 C_{O2}^p}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_{O2}^p}{\partial r}\right) - W \tag{1-1}$$

สมดุลความร้อนสำหรับเฟสก๊าซและเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยา ดังสมการ (1-2) และ (1-3) ตามลำดับ

$$uc_p \frac{\partial T_g}{\partial l} = \alpha S_p\left(T_p - T_g\right) \tag{1-2}$$

$$\gamma_p \frac{\partial T_p}{\partial t} = -\alpha S_p\left(T_p - T_g\right) + \lambda_l \frac{\partial^2 T_p}{\partial l^2} + \frac{1}{V}\int_V WQdV \tag{1-3}$$

ความเข้มข้นโค้กบนในเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยา ดังสมการ (1-4)

$$\frac{\partial \theta_p}{\partial t} = -W \tag{1-4}$$

ความเข้มข้นก๊าซออกซิเจน ดังสมการ (1-5)

$$u\frac{\partial C_{O2}}{\partial l} = \beta S_p\left(C_{O2}^p\Big|_{r=R} - C_{O2}\right) \tag{1-5}$$

จากสมการ (1-1) ถึง (1-5) การหาผลเฉลยของสมการทั้งหมดได้ด้วยวิธีการหาผลเฉลยโดยตรงทำได้ยาก หรือแทบจะเป็นไปไม่ได้ ดังนั้นจึงได้มีการคิดระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขขึ้นมาเพื่อแก้ปัญหาดังกล่าว แต่ค่าที่ได้ก็ยังมีความคลาดเคลื่อนแต่คำตอบที่ได้จากระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขสามารถยอมรับได้

1.2 ความคลาดเคลื่อน

ความคลาดเคลื่อนเป็นการเปรียบเทียบระหว่างผลเฉลยที่ได้จากการคำนวณที่ได้กับผลเฉลยที่แท้จริง (exact solution) สำหรับระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขได้นิยามความคลาดเคลื่อนดังนี้

ค่าแท้จริง (true value) = ค่าคำนวณ (approximation) + ค่าคลาดเคลื่อน (error)

ดังนั้น ค่าคลาดเคลื่อนในระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขสามารถแทนด้วยสมการ (1-6)

ค่าคลาดเคลื่อน (E_t) = ค่าแท้จริง – ค่าคำนวณจากระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลข (1-6)

ค่าคลาดเคลื่อน (E_t) ในสมการ (1-6) เป็นค่าความคลาดเคลื่อนที่แท้จริง

ความคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์สามารถหาได้จากสมการ (1-7) แต่โดยส่วนมากความคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์มักจะรายงานในรูปของ (ε_t) ซึ่งสามารถหาได้จากสมการ (1-8)

ค่าคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ = (ค่าแท้จริง – ค่าคำนวณ)/ค่าแท้จริง (1-7)

เปอร์เซ็นต์ค่าคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ = (ค่าแท้จริง – ค่าคำนวณ)x100/ค่าแท้จริง % (1-8)

นอกจากนี้ในการคำนวณด้วยระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขจะไม่มีทางทราบค่าแท้จริงได้ ดังนั้นเพื่อหยุดการคำนวณด้วยระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลขจึงได้นิยามค่าความคลาดเคลื่อนประมาณค่า (approximate error) ดังสมการ (1-9)

ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่า = ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่ารอบปัจจุบัน

– ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่ารอบก่อนหน้า (1-9)

ดังนั้นเปอร์เซ็นต์ค่าความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (relative approximate error, ε_a) ดังสมการ (1-10)

เปอร์เซ็นต์ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ = (ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่ารอบปัจจุบัน – ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่ารอบก่อนหน้า)x100/ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่ารอบปัจจุบัน (1-10)

จากสมการ (1-10) เปอร์เซ็นต์ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์สามารถเป็นได้ทั้งค่าบวกและลบ เพื่อให้เปอร์เซ็นต์ค่าคลาดเคลื่อนค่าสัมพัทธ์มีค่าเป็นบวก ($|\varepsilon_a|$) จึงใส่เครื่องหมายค่าสมบูรณ์ (absolute) และกำหนดให้เปอร์เซ็นต์ค่าความคลาดเคลื่อนที่ต้องการ (ε_s) เป็นค่าที่กำหนดให้หยุดการคำนวณด้วยระเบียบวิธีการคำนวณเชิงตัวเลข ดังสมการ (1-11)

$$|\varepsilon_a| < \varepsilon_s \tag{1-11}$$

สำหรับการกำหนดค่าเปอร์เซ็นต์ค่าความคลาดเคลื่อนที่ต้องการ (ε_s) พบว่าขึ้นกับตำแหน่งทศนิยมของเลขนัยสำคัญ (n) ดังสมการ (1-12)

$$\varepsilon_s = (0.5x10^{2-n})\% \tag{1-12}$$

ตัวอย่างที่ 1.1 e^x ซึ่งสามารถใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ดังสมการ (E1.1-1)

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \ldots + \frac{x^n}{n!} \qquad \text{(E1.1-1)}$$

จงประมาณจำนวนพจน์ของอนุกรมกำลัง Maclaurin ที่ทำให้ค่าประมาณของ $e^{0.5}$ มีความถูกต้องถึง 3 ตำแหน่งเลขนัยสำคัญ พร้อมหาเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ (ε_t) และเปอร์เซ็นต์ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (ε_a) ถ้าค่าจริงแท้ของ $e^{0.5}$ เท่ากับ 1.648

วิธีทำ

เนื่องจากโจทย์กำหนดให้หาค่าประมาณของ $e^{0.5}$ มีความถูกต้องถึง 3 ตำแหน่งเลขนัยสำคัญ ดังนั้น เปอร์เซ็นต์ค่าความคลาดเคลื่อนที่ต้องการ (ε_s) สามารถหาได้จากสมการ (1-12) เมื่อแทนค่า n เท่ากับ 3

$$\varepsilon_s = (0.5x10^{2-3}) = 0.05\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 1 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648-1)}{1.648}x100 = 39.32\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 2 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1 + x = 1 + 0.5 = 1.5$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648-1.5)}{1.648}x100 = 8.98\%$$

$$\varepsilon_a = \frac{(1.5-1)}{1.5}x100 = 33.33\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 3 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} = 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} = 1.625$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648-1.625)}{1.648}x100 = 1.40\%$$

$$\varepsilon_a = \frac{(1.625-1.5)}{1.625}x100 = 7.69\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 4 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} = 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} = 1.646$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648-1.646)}{1.648}x100 = 0.12\%$$

$$\varepsilon_a = \frac{(1.646-1.625)}{1.646}x100 = 1.28\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 5 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} = 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} + \frac{0.5^4}{24} = 1.649$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648 - 1.649)}{1.648} x100 = -0.06\%$$

$$\varepsilon_a = \frac{(1.649 - 1.626)}{1.649} x100 = 0.18\%$$

เมื่อใช้อนุกรมกำลัง Maclaurin ที่มีพจน์ 6 พจน์ เมื่อ x เท่ากับ 0.5

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} = 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} + \frac{0.5^4}{24} + \frac{0.5^5}{120} = 1.649$$

$$\varepsilon_t = \frac{(1.648 - 1.649)}{1.648} x100 = -0.06\%$$

$$\varepsilon_a = \frac{(1.649 - 1.649)}{1.649} x100 = 0.00\%$$

ซึ่งผลการการคำนวณสามารถเขียนสรุปดังตารางที่ E1.1-1

ตารางที่ E1.1-1 ผลการการคำนวณ $e^{0.5}$ ด้วยอนุกรมกำลัง Maclaurin

จำนวนพจน์	ค่าที่คำนวณได้	ε_t,%	ε_a,%
1	1	39.32	-
2	1.5	8.98	33.33
3	1.625	1.4	7.69
4	1.646	0.12	1.28
5	1.649	-0.06	0.18
6	1.649	-0.06	0.00

1.3 ความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษ

ความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษ (Round-Off Errors) เป็นความคลาดเคลื่อนที่มักพบเวลาใช้เครื่องคิดเลขในการคำนวณ ซึ่งขึ้นกับผู้คำนวณว่าจะเลือกเอาตำแหน่งเลขนัยสำคัญกี่ตำแหน่ง ดังเช่นในการคำควณในตัวอย่างที่ 1.1 ซึ่งกำหนดว่าใช้ตำแหน่งเลขนัยสำคัญ 3 ตำแหน่ง ถ้าเพิ่มตำแหน่งเลขนัยสำคัญเป็น 4 ตำแหน่ง ผลการคำนวณที่ได้จะแตกต่างกัน นอกจากนี้ยังมีค่าที่ได้จากการคำนวณที่ได้ตำแหน่งเลขนัยสำคัญเป็นจำนวนอนันต์ เช่น

π มีค่าเท่ากับ 3.141592654...... ซึ่งผู้คำนวณอาจเลือกใช้แค่ 3.141 หรือ 3.141593 เป็นต้น

e มีค่าเท่ากับ 2.718281829...... ซึ่งผู้คำนวณอาจเลือกใช้แค่ 2.71828

ซึ่งการเลือกใช้จำนวนตำแหน่งเลขนัยสำคัญต่างกัน จะทำให้เกิดความคลาดเคลื่อนในระหว่างการคำนวณได้

1.4 ความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลายของอนุกรมเทเลอร์

ถ้า f(x) เป็นฟังก์ชันที่มีอนุกรมกำลังรอบจุด a ซึ่งมีจำนวนจริง R บวก ที่ทำให้ $f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n(x-a)^n$ สำหรับทุกๆ ค่า x ที่ $|x-a|<R$ แล้วจะได้ $a_n=\dfrac{f^{(n)}(a)}{n!}$ คืออนุพันธ์อันดับ n ที่ a ดังนั้นสามารถเขียนอนุกรมเทเลอร์รอบจุด a ได้ดังสมการ (1-12)

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n \tag{1-12}$$

จากสมการ (1-12) สามารถเขียนกระจายพจน์ต่างๆ และถ้าให้ $h=x-a$ จะได้ดังสมการ (1-13)

$$f(x)=f(a)+\frac{f'(a)h}{1!}+\frac{f''(a)h^2}{2!}+\frac{f^3(a)h^3}{3!}+\ldots+\frac{f^n(a)h^n}{n!}+\ldots \tag{1-13}$$

ถ้ากำหนดให้ $a=0$ ดังนั้นถ้ากำหนดให้จุดถัดไปของค่า x มีค่าเท่ากับ $x_{i+1}=x_i+h$ ซึ่งจะทำให้สมการ (1-13) กลายเป็นสมการ (1-14)

$$f(x_{i+1})=f(x_i)+\frac{f'(x_i)h}{1!}+\frac{f''(x_i)h^2}{2!}+\frac{f^3(x_i)h^3}{3!}+\ldots+\frac{f^n(x_i)h^n}{n!}+\ldots \tag{1-14}$$

การประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับศูนย์ (the zero-order approximation) สามารถเขียนสมการได้เป็น (1-15)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i) \tag{1-15}$$

การประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับหนึ่ง (the first-order approximation) สามารถเขียนสมการได้เป็น (1-16)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i)+f'(x_i)h \tag{1-16}$$

การประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับสอง (the second-order approximation) สามารถเขียนสมการได้เป็น (1-17)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{f''(x_i)h^2}{2!} \tag{1-17}$$

สำหรับการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับ n (the n-order approximation) สามารถเขียนสมการได้เป็น (1-18)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{f''(x_i)h^2}{2!}+\frac{f^3(x_i)h^3}{3!}+\ldots+\frac{f^n(x_i)h^n}{n!} \tag{1-18}$$

ตัวอย่างที่ 1.2 จงเขียน e^x ให้อยู่ในรูปอนุกรมเทเลอร์รอบจุด a เมื่อ a มีค่าเท่ากับ 0

วิธีทำ

จากสมการ (1-12) สามารถเขียนอนุกรมเทเลอร์ได้เป็น (E1.2-1) เมื่อ a มีค่าเท่ากับ 0

$$\frac{f^0(0)}{0!}=\frac{e^o}{0!}=1 \text{ และ } \frac{f^n(0)}{n!}=\frac{e^o}{n!}=\frac{1}{n!}$$

$$f(x)=e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n=1+\frac{x}{1!}+\frac{x^2}{2!}+\frac{x^3}{3!}\ldots+\frac{x^n}{n!}$$

ตัวอย่างที่ 1.3 จงหาค่า $\cos\left(\frac{\pi}{3}\right)$ ด้วยการประมาณค่าฟังก์ชันจากอนุกรมเทย์เลอร์ตั้งแต่อันดับ ศูนย์ ถึงอันดับหก เมื่อจุด a มีค่าเท่ากับ $\pi/4$ และหาเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ (ε_t)

วิธีทำ

จากสมการ (1-18)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{f''(x_i)h^2}{2!}+\frac{f^3(x_i)h^3}{3!}+\ldots+\frac{f^n(x_i)h^n}{n!} \qquad (1\text{-}18)$$

สำหรับการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับอันดับหกสามารถเขียนได้ดังสมการ (E1.3-1)

$$f(x_{i+1})\cong f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{f^2(x_i)h^2}{2!}+\frac{f^3(x_i)h^3}{3!}+\frac{f^4(x_i)h^4}{4!}+\frac{f^5(x_i)h^5}{5!}+\frac{f^6(x_i)h^6}{6!} \qquad (E1.3\text{-}1)$$

เมื่อ

$$h=x_{i+1}-x_i=\frac{\pi}{3}-\frac{\pi}{4}=\frac{\pi}{12}$$

$$f(x_i)=\cos(\pi/4)$$

$$f'(x_i)=-\sin(\pi/4)$$

$$f^2(x_i)=-\cos(\pi/4)$$

$$f^3(x_i)=\sin(\pi/4)$$

$$f^4(x_i)=\cos(\pi/4)$$

$$f^5(x_i)=-\sin(\pi/4)$$

$$f^6(x_i)=-\cos(\pi/4)$$

แทนค่าพจน์ต่างๆ ลงในสมการ (E1.3-1) ดังสมการ (E1.3-2)

$$\cos(\pi/3)\cong\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)+\left[-\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)+\frac{1}{2!}\left[-\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)^2+\frac{1}{3!}\left[\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)^3$$

$$+\frac{1}{4!}\left[\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)^4+\frac{1}{5!}\left[-\sin\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)^5+\frac{1}{6!}\left[-\cos\left(\frac{\pi}{4}\right)\right]\left(\frac{\pi}{12}\right)^6$$

(E1.3-2)

เมื่อค่าจริงของ $\cos(\pi/3)=0.5$ และ $\cos(\pi/4)=\sin(\pi/4)=0.707107$ และ $-\cos(\pi/4)=0.707107$ และ $-\sin(\pi/4)=-0.707107$ ซึ่งค่าที่คำนวณได้สามารถสรุปในตารางที่ E1.2-1

ตารางที่ E1.2-1 การประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับต่างๆ ($f(x_{i+1})$)

อันดับ	$f''(x_i)$	h'' h	$f(x_{i+1})$	ε_t
0	0.707107	1.000000	0.707107	41.42%
1	-0.707107	0.261799	0.521987	4.40%
2	-0.707107	0.068539	0.497754	0.45%
3	0.707107	0.017943	0.499869	2.62E-02
4	0.707107	0.004698	0.500008	1.51E-03
5	-0.707107	0.001230	0.500000	6.08E-05
6	-0.707107	0.000322	0.500000	2.44E-06

1.4.1 ส่วนเหลือจากการตัดพจน์ในอนุกรมเทเลอร์

ส่วนเหลือจากการตัดพจน์ในอนุกรมเทเลอร์ (Remainder) เป็นค่าความคลาดเคลื่อนจากการใช้อนุกรมเทเลอร์ในการหาค่าคำตอบ ตัวอย่างเช่นในการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับศูนย์ พบว่าเป็นไปตามสมการ (1-15)

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i) \tag{1-15}$$

ซึ่งค่าส่วนเหลือจากการตัดพจน์สำหรับการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับศูนย์ (R_0) พบว่าเป็นไปตามสมการ (1-19)

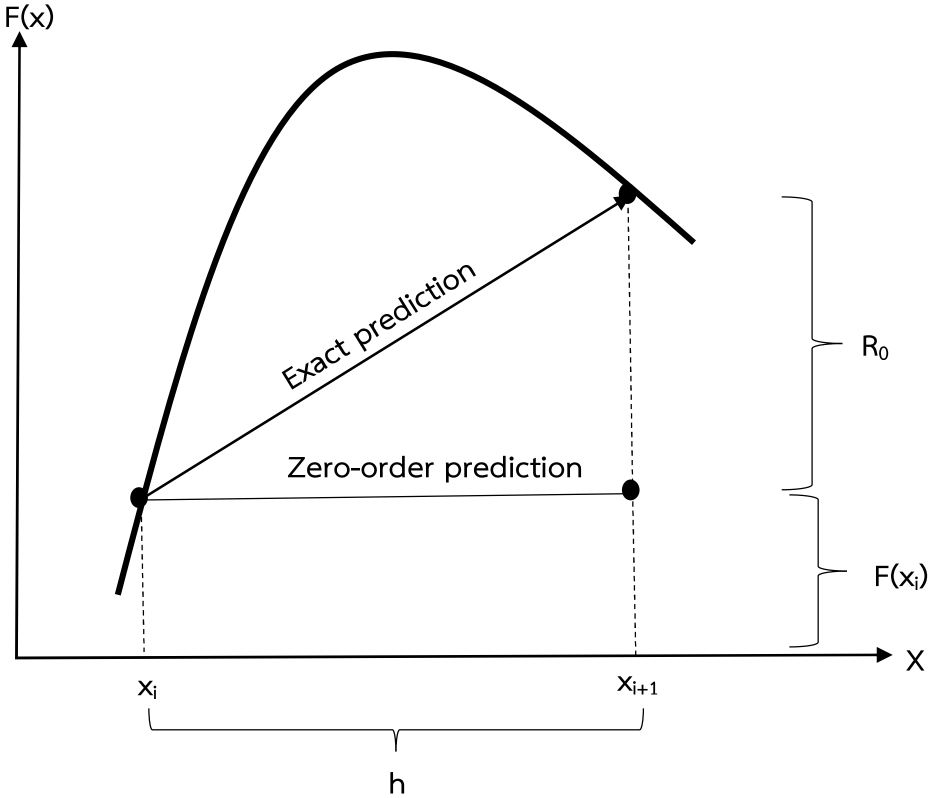
$$R_0 = f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)h^2}{2!} + \frac{f^3(x_i)h^3}{3!} + \dots \tag{1-19}$$

ถ้าเขียนกราฟระหว่าง x กับ $f(x)$ จะได้ดังรูปที่ 1.1 จากรูปที่ 1.1 พบว่าค่า R_0 จะมีค่าเท่ากับสมการ (1-20)

$$R_0 \cong f'(x_i) \tag{1-20}$$

ดังนั้นสมการ (1-20) คือค่าความชันจะทำให้สมการ (1-20) เป็นสมการ (1-21)

$$f'(x_i) \cong \frac{R_0}{h} \tag{1-21}$$



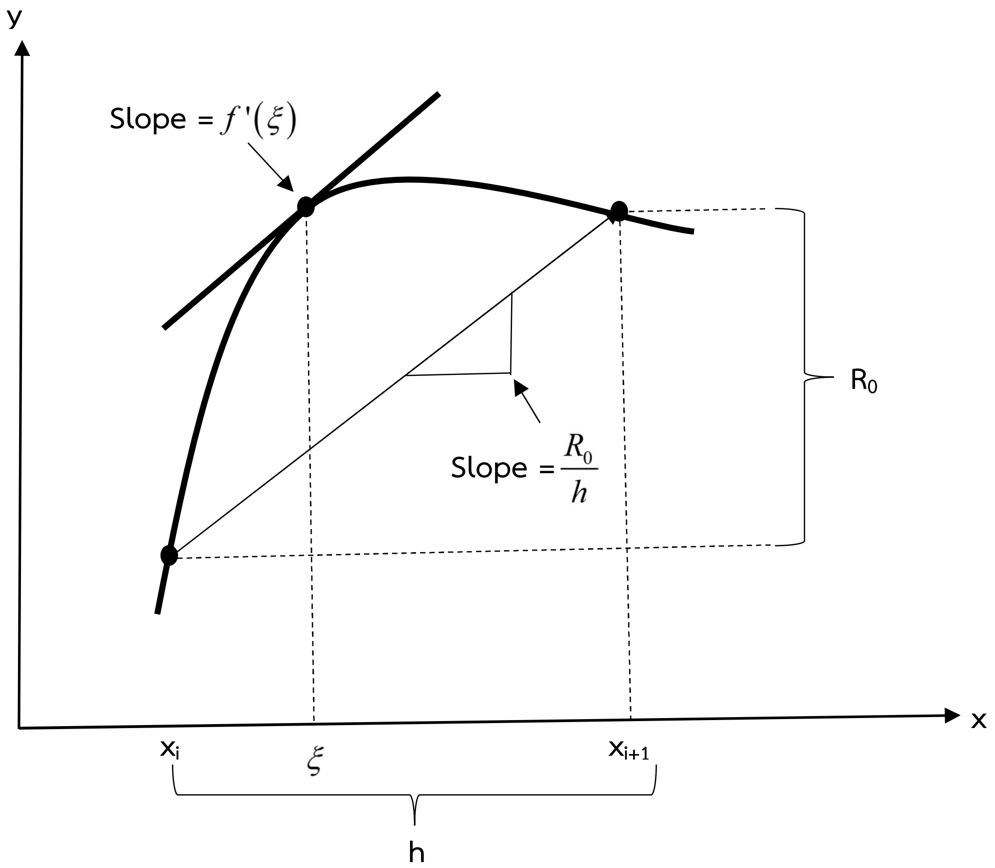
รูปที่ 1.1 ค่าส่วนเหลือจากการตัดพจน์สำหรับการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับศูนย์ (R_0)
ที่มา: Chapra (2010)

จากรูปที่ 1.1 จะเห็นได้ว่าถ้าหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งตั้งแต่ x_i ถึง x_{i+1} จะพบว่ามีจุดหนึ่งที่ทำให้อนุพันธ์อันดับหนึ่งมีค่าเท่ากับสมการ (1-21) สมมุติว่าจุดนั้นคือจุด ξ ดังนั้นอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่จุด ξ สามารถเขียนได้เป็นสมการ (1-22) ดังรูปที่ 1.2

$$f'(\xi) = \frac{R_0}{h} \tag{1-22}$$

จากสมการ (1-22) ทำให้สามารถหาค่า R_0 ได้ดังสมการ (1-23)

$$R_0 = f'(\xi)h \tag{1-23}$$



รูปที่ 1.2 ภาพประกอบการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่จุด x เท่ากับ ξ
ที่มา: Chapra (2010)

สำหรับการหาส่วนเหลือจากการตัดพจน์สำหรับการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับหนึ่ง (R_1) สามารถเขียนได้เป็นสมการ (1-24)

$$R_1 = \frac{f''(\xi)h^2}{2!} \tag{1-24}$$

1.4.2 การประมาณค่าความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษด้วยอนุกรมเทเลอร์

สมมุติให้สมการความเร็วของการเคลื่อนที่ ($v(t)$) โดยการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับ n ได้ดังสมการ (1-25)

$$v(t_{i+1}) = v(t_i) + v'(t_i)(t_{i+1} - t_i) + \frac{v''(t_i)(t_{i+1} - t_i)^2}{2!} + \frac{v^3(t_i)(t_{i+1} - t_i)^3}{3!} + \ldots + R_n \tag{1-25}$$

กรณีค่าความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษด้วยการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับหนึ่ง (R_1) ดังสมการ (1-26)

$$v(t_{i+1}) = v(t_i) + v'(t_i)(t_{i+1} - t_i) + R_1 \tag{1-26}$$

หรืออนุพันธ์อันดับหนึ่งของความเร็วของการเคลื่อนที่ดังสมการ (1-27)

$$v'(t_i) = \frac{v(t_{i+1}) - v(t_i)}{t_{i+1} - t_i} - \frac{R_1}{t_{i+1} - t_i} \tag{1-27}$$

ในสมการ (1-27) เทอม $\frac{v(t_{i+1}) - v(t_i)}{t_{i+1} - t_i}$ เป็นค่าที่ได้จากการประมาณค่าฟังก์ชันด้วยอนุกรมเทเลอร์อันดับหนึ่ง ส่วนเทอม $\frac{R_1}{t_{i+1} - t_i}$ เป็นค่าความคลาดเคลื่อนจากการปัดเศษ เมื่อเทียบระหว่างสมการ (1-24) จะได้เป็นสมการ (1-28)

$$R_1 = \frac{f''(\xi)h^2}{2!} \tag{1-24}$$

$$\frac{R_1}{t_{i+1} - t_i} = \frac{v''(\xi)}{2!}\left(t_{i+1} - t_i\right) \tag{1-28}$$

หรือเขียนอย่างงานดังสมการ (1-29)

$$\frac{R_1}{t_{i+1} - t_i} = O\left(t_{i+1} - t_i\right) \tag{1-29}$$

ซึ่ง $O\left(t_{i+1} - t_i\right) = O(h)$ คือความคลาดเคลื่อน

1.5 แบบฝึกหัด

HM1.1 จงหาอนุกรมเทร์เลอร์ของฟังก์ชัน $f(x)=\ln\left(\frac{1}{1-x}\right)$

HM1.2 จงหาอนุกรมเทร์เลอร์ของฟังก์ชัน $f(x)=\sin x$

HM1.3 จงหาค่าประมาณค่าของ $f(x)=e^x$ ที่ $x=1$ จากจุด $x=0$ ด้วยอนุกรมเทร์เลอร์ตั้งแต่อันดับ ศูนย์ ถึงอันดับหกและหาเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนสัมพัทธ์ (ε_t) เมื่อค่าจริงของเท่ากับ $e=2.7183$

HM1.4 จงหาค่าประมาณค่าของ $f(x)=e^{-x}$ ที่ $x=1$ จากจุด $x=0$ ด้วยอนุกรมเทร์เลอร์ตั้งแต่อันดับ ศูนย์ ถึงอันดับหก

1.6 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. Rao V. Dukkipati, Numerical Methods, New Age International (P) Limited, 2010

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 2

หัวข้อการสอน

บทที่ 2 การหารากของสมการ ในหัวข้อ 2.1 – 2.4

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่จำเป็นต้องหารากของสมการ
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีกราฟในการหารากของสมการ
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วงในการหารากของสมการ
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่งในการหารากของสมการ

เนื้อหา

1. อธิบายความสำคัญของการหารากของสมการ
2. บทนำ

3 ระเบียบวิธีกราฟ

4 ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง

5 ระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 2 การหารากของสมการ

2.1 บทนำ

ในการแก้ปัญหาทางวิศวกรรมศาสตร์บางกรณีต้องมีการหารากของสมการ หรือ การหาค่า x เพื่อให้ได้คำตอบของสมการ $f(x)$ เท่ากับ 0 สำหรับวิธีหารากของสมการทั่วไปที่เป็นที่รู้จัดกันดีได้แก่ การหารากของสมการกำลังสอง และรากของสมการกำลังสาม

สมการกำลังสองมีสูตรทั่วไปดังสมการ (2-1)

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

รากของสมการสามารถหาได้จากสมการ (2-2) ซึ่งสามารถมีคำตอบได้คำตอบเดียว หรือ สองคำตอบ

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

สำหรับสมการกำลังสามมีสูตรทั่วไปดังสมการ (2-3) สำหรับรากของสมการกำลังสามที่มีคำตอบเป็นจำนวนจริง

$$f(x) = x^3 + ax^2 + bx + c = 0 \tag{2-3}$$

กำหนดให้ $p = b - \frac{a^2}{3}$ และ $q = \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} + c$

รากของสมการกำลังสามแบ่งออกเป็น 3 กรณี เมื่อพิจารณาค่า Δ ดังสมการ (2-4)

$$\Delta = \frac{q^3}{4} + \frac{p^3}{27} \tag{2-4}$$

ถ้า $\Delta > 0$ รากของสมการกำลังสามจะเป็นจำนวนจริง 1 ค่า

$$x = \left(-\frac{q}{2} + \sqrt{\Delta}\right)^{\frac{1}{3}} + \left(-\frac{q}{2} - \sqrt{\Delta}\right)^{\frac{1}{3}} - \frac{a}{3}$$

ถ้า $\Delta = 0$ รากของสมการกำลังสามจะเป็นจำนวนจริง 2 ค่าและมีค่าซ้ำกัน

$$x_1 = -2\left(\frac{q}{2}\right)^{\frac{1}{3}} - \frac{a}{3} \quad \text{และ} \quad x_2 = x_3 = \left(\frac{q}{2}\right)^{\frac{1}{3}} - \frac{a}{3}$$

ถ้า $\Delta < 0$ รากของสมการกำลังสามจะเป็นจำนวนจริง 3 ค่า

$$x_1 = \frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{-p}\sin\left(\frac{1}{3}\sin^{-1}\left(\frac{3\sqrt{3}q}{2\left(\sqrt{-p}\right)^3}\right)\right) - \frac{a}{3}$$

$$x_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{-p}\sin\left(\frac{1}{3}\sin^{-1}\left(\frac{3\sqrt{3}q}{2\left(\sqrt{-p}\right)^3}\right) + \frac{\pi}{3}\right) - \frac{a}{3}$$

$$x_2 = -\frac{2}{\sqrt{3}}\sqrt{-p}\cos\left(\frac{1}{3}\sin^{-1}\left(\frac{3\sqrt{3}q}{2\left(\sqrt{-p}\right)^3}\right)+\frac{\pi}{6}\right)-\frac{a}{3}$$

จากการหารากสมการกำลังสองและรากของสมการกำลังสามเป็นตัวอย่างของสมการพหุนาม (polynomial equations) แต่ในบางปัญหาทางวิศวกรรมจะไม่ได้อยู่ในรูปแบบของสมการพหุนามซึ่งสามารถแก้หาคำตอบของรากสมการได้ ตัวอย่างเช่น

การหาค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานของท่อ (friction number, f) จากสูตรของ Colebrook สำหรับ $\mathrm{Re} > 4,000$ ดังสมการ (2-5)

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4\log\left[\frac{\varepsilon}{3.7D}+\frac{1.256}{\mathrm{Re}\sqrt{f}}\right] \qquad (2\text{-}5)$$

ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและปริมาตรของก๊าซจากสมการสภาวะ (Equation of State) ของ Soave-Redlich-Kwong (SRK) ดังสมการ (2-6)

$$P = \frac{RT}{\overline{V}-b}-\frac{\alpha a}{\overline{V}\left(\overline{V}+b\right)} \qquad (2\text{-}6)$$

ดังนั้นในบทนี้ได้นำเสนอวิธีการหาค่าของรากสมการด้วยวิธีการต่างๆ ดังนี้ ระเบียบวิธีกราฟ ระเบียบวิธีซ้ำเดิมเชิงเดียว ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง ระเบียบวิธีแก้ตำแหน่งผิด ระเบียบวิธีเส้นตัดโค้ง ระเบียบวิธีของนิวตัน

2.2 ระเบียบวิธีกราฟ

การหาค่า x ที่เป็นรากของสมการ $f(x)=0$ สามารถทำได้โดยระเบียบวิธีกราฟ โดยค่าของ x คือจุดตัดแกน x ซึ่งการที่เราจะได้ค่ารากของสมการที่มีความถูกต้องจำเป็นต้องเสียเวลาค่อนข้างมาก แต่เป็นวิธีการหารากของสมการที่ง่าย

ตัวอย่างที่ 2.1 จงหาความหนาของฉนวน (r_i) สำหรับหุ้มขดลวดความร้อน โดยพบว่าอุณหภูมิภายในขดลวดเป็นไปตามสมการ (E2.1-1)

$$T_w = T_{air}+\frac{q}{2\pi}\left[\frac{1}{k}\ln\left(\frac{r_w+r_i}{r_w}\right)+\frac{1}{h}\frac{1}{r_w+r_i}\right] \qquad (E2.1\text{-}1)$$

เมื่อ T_w คืออุณหภูมิที่รัศมีของขดลวด (500K) T_{air} คืออุณหภูมิอากาศ (293K) q คือ อัตราการผลิตความร้อน (75 W/m) k คือ ความการนำความร้อนของฉนวน (0.1 W/(m-K) r_w คือ รัศมีของขดลวด (6 mm) r_i คือความหนาของฉนวน (mm) และ h คือสัมประสิทธิ์การพาความร้อน (12 W/(m^2-K))

วิธีทำ

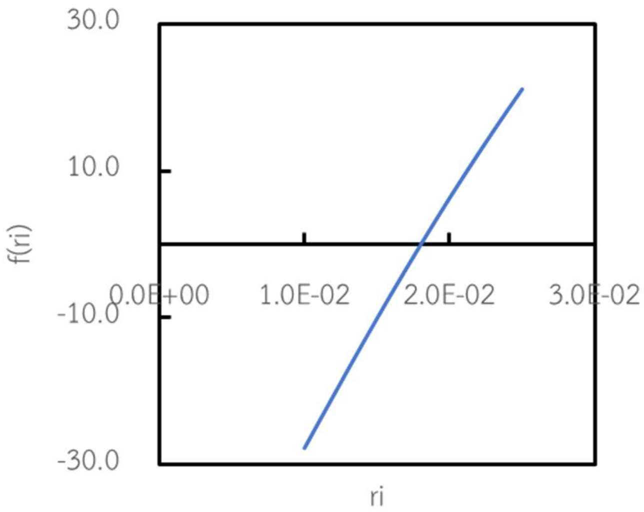
จากสมการ (E2.1-1) จัดรูปสมการใหม่เพื่อให้อยู่ในรูป $f(x)=0$ ดังสมการ (E2.1-2) ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่อยู่ในรูปของ r_i

$$f(r_i) = T_{air} + \frac{q}{2\pi}\left[\frac{1}{k}\ln\left(\frac{r_w + r_i}{r_w}\right) + \frac{1}{h}\frac{1}{r_w + r_i}\right] - T_w = 0 \qquad \text{(E2.1-2)}$$

แทนค่าต่างๆ ลงในสมการ (E2.1-2)

$$f(r_i) = 293 + \frac{75}{2\pi}\left[\frac{1}{0.1}\ln\left(\frac{0.006 + r_i}{0.006}\right) + \frac{1}{12}\frac{1}{0.006 + r_i}\right] - 500$$

หารากของสมการโดยระเบียบวิธีกราฟดังรูปที่ E2.1-1

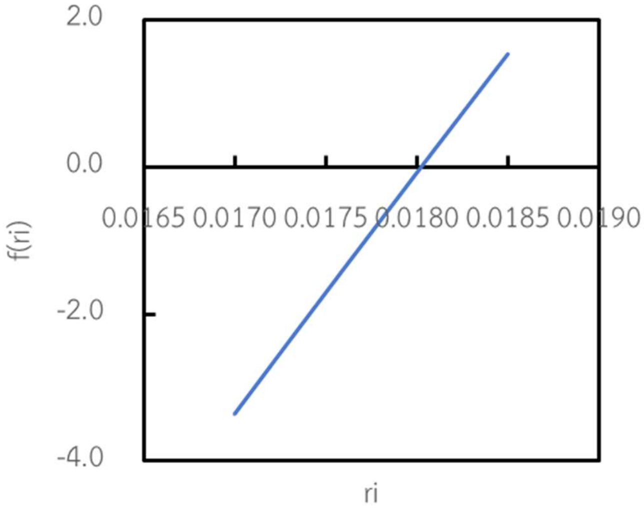


รูปที่ E2.1-1 ความสัมพันธ์ระหว่าง r_i กับ $f(r_i)$

จากรูปที่ E2.1-1พบว่า $f(r_i) = 0$ จะอยู่ในช่วงของ r_i ระหว่าง 0.018 และ 0.019 ซึ่งให้ค่า $f(r_i) = -0.0767$ และ $f(r_i) = 3.1382$ ตามลำดับ

ถ้าต้องการความละเอียดของ r_i สามารถทำได้โดยทำระเบียบวิธีกราฟซ้ำซึ่งให้ผลการคำนวณดังรูปที่ E2.1-2

จากรูปที่ E2.1-2 พบว่า $f(r_i) = 0$ จะอยู่ในช่วงของ r_i ระหว่าง 0.018020 และ 0.018025 ซึ่งให้ค่า $f(r_i) = -0.01178$ และ $f(r_i) = 0.004446$ ตามลำดับ ดังนั้นเพื่อหาค่า $f(r_i) = 0$ เราสามารถใช้สมการเส้นตรงในการหาได้ ซึ่งจะได้เท่ากับ



รูปที่ E2.1-2 ความสัมพันธ์ระหว่าง r_i กับ $f(r_i)$

2.3 ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง

ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง (bisection method) เป็นวิธีการอาศัยการแบ่งครึ่งช่วงในการหารากของสมการ จากระเบียบวิธีกราฟพบว่ารากของสมการจะอยู่ในช่วงการเปลี่ยนแปลงค่า $f(x)$ จากค่าเป็น + ไปเป็น − หรือจาก − ไปเป็น + ดังนั้น ระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วงจึงมีขั้นตอนดำเนินการดังนี้

ขั้นที่ 1. การทดสอบช่วงของค่า x_l และ x_u ว่ามีรากของสมการ

กำหนดให้ x_l เป็นค่า x จุดเริ่มต้น และ x_u เป็นค่า x จุดปลาย ดังนั้น ถ้า $f(x_l)f(x_u)<0$ แสดงว่าการกำหนดช่วงในการหารากสมการถูกต้อง แต่ถ้า $f(x_l)f(x_u)>0$ แสดงว่าการกำหนดช่วงในการหารากสมการไม่ถูกต้อง และถ้า $f(x_l)f(x_u)=0$ แสดงว่า ไม่ x_l หรือ x_u เป็นรากของสมการ

ขั้นที่ 2. การหาตำแหน่ง x_r ซึ่งเป็นตำแหน่งที่อยู่ต้องกลางระหว่าง x_l และ x_u

กำหนดให้ $x_r = \dfrac{x_u + x_l}{2}$

ขั้นที่ 3. การหาผลคูณระหว่าง $f(x_l)$ และ $f(x_r)$ โดยมีเงื่อนไขดังนี้

ถ้า $f(x_l)f(x_r)<0$ แสดงว่าในช่วงระหว่าง x_l และ x_r มีรากของสมการ ดังนั้นกำหนดให้ $x_u^{new}=x_r$ แล้วทำซ้ำใหม่ตั้งแต่ขั้นตอนที่ 2

ถ้า $f(x_l)f(x_r)>0$ แสดงว่าในช่วงระหว่าง x_l และ x_r ไม่มีรากของสมการ ดังนั้นกำหนดให้ $x_l^{new}=x_r$ แล้วทำซ้ำใหม่ตั้งแต่ขั้นตอนที่ 2

ถ้า $f(x_l)f(x_r)=0$ แสดงว่า x_r เป็นรากของสมการ

ตัวอย่างที่ 2.2 ปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำกลายเป็นก๊าซไฮโดรเจนและออกซิเจนพบว่าเป็นไปตามสมการต่อไปนี้ $K = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2P}{2+x}}$ เมื่อ K คือค่าคงที่สมดุล (atm) x สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน P ความดันร่วม (atm) ถ้ากำหนดให้ K เท่ากับ 0.05 และ P เท่ากับ 3 atm จงหาสัดส่วนโมลของไฮโดรเจนด้วยระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง เมื่อเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ต่ำกว่า 0.02%

วิธีทำ

จากสมการ $K = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2P}{2+x}}$ จัดรูปใหม่จะได้เป็น (E2.2-1)

$$f(x) = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2P}{2+x}} - K \qquad \text{(E2.2-1)}$$

แทนค่า K เท่ากับ 0.05 atm และ P เท่ากับ 3 atm ดังสมการ (E2.2-2)

$$f(x) = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2x3}{2+x}} - 0.05 = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{6}{2+x}} - 0.05 \qquad \text{(E2.2-2)}$$

รอบที่ 1

กำหนดให้ $x_l = 0$ และ $x_u = 0.9$ ซึ่งจะได้ค่า $f(x_l) = -0.05$ และ $f(x_u) = 12.89551$

ขั้นที่ 1. การทดสอบช่วงของค่า x_l และ x_u ว่ามีรากของสมการ

$f(x_l)f(x_u) < 0$ แสดงว่าช่วงดังกล่าวมีรากของสมการ

ขั้นที่ 2. การหาตำแหน่ง x_r

$$x_r = \frac{x_u + x_l}{2} = \frac{0+0.9}{2} = 0.45$$

ขั้นที่ 3. การหาผลคูณระหว่าง $f(x_l)$ และ $f(x_r)$

$f(x_r) = 1.23039$ ซึ่ง $f(x_l)f(x_r) = -0.06152$ ซึ่งตรงกับเงื่อนไข $f(x_l)f(x_r) < 0$ ดังนั้น $x_l^{new} = 0$ และ $x_u^{new} = 0.45$

รอบที่ 2

ขั้นที่ 2. การหาตำแหน่ง x_r

$$x_r = \frac{x_u + x_l}{2} = \frac{0+0.45}{2} = 0.225$$

ขั้นที่ 3. การหาผลคูณระหว่าง $f(x_l)$ และ $f(x_r)$

$f(x_r) = 0.426751$ ซึ่ง $f(x_l)f(x_r) = -0.02134$

ซึ่งตรงกับเงื่อนไข $f(x_l)f(x_r) < 0$ ดังนั้น $x_l^{new} = 0$ และ $x_u^{new} = 0.225$

$$|\varepsilon_a| = \left|\frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}}\right| x100 = \left|\frac{0.0225 - 0.45}{0.0225}\right| x100 = 100\%$$

สำหรับผลการคำนวณหารากของสมการรอบต่างๆ สามารถสรุปได้ตามตารางที่ E2.2-1

ตารางที่ E2.2-1 ผลการคำนวณหารากของสมการตามระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง

รอบที่	xl	f(xl)	xu	f(xu)	xr	f(xr)	f(xr)*f(xl)	xl,new	xu,new	err
1	0.000000	-0.050000	0.900000	12.895509	0.450000	1.230390	-0.061520	0.000000	0.450000	
2	0.000000	-0.050000	0.450000	1.230390	0.225000	0.426751	-0.021338	0.000000	0.225000	100.000000
3	0.000000	-0.050000	0.225000	0.426751	0.112500	0.163630	-0.008181	0.000000	0.112500	100.000000
4	0.000000	-0.050000	0.112500	0.163630	0.056250	0.051813	-0.002591	0.000000	0.056250	100.000000
5	0.000000	-0.050000	0.056250	0.051813	0.028125	-0.000225	0.000011	0.028125	0.056250	100.000000
6	0.028125	-0.000225	0.056250	0.051813	0.042188	0.025497	-0.000006	0.028125	0.042188	33.333333
7	0.028125	-0.000225	0.042188	0.025497	0.035156	0.012564	-0.000003	0.028125	0.035156	20.000000
8	0.028125	-0.000225	0.035156	0.012564	0.031641	0.006151	-0.000001	0.028125	0.031641	11.111111
9	0.028125	-0.000225	0.031641	0.006151	0.029883	0.002959	-0.000001	0.028125	0.029883	5.882353
10	0.028125	-0.000225	0.029883	0.002959	0.029004	0.001366	0.000000	0.028125	0.029004	3.030303
11	0.028125	-0.000225	0.029004	0.001366	0.028564	0.000570	0.000000	0.028125	0.028564	1.538462
12	0.028125	-0.000225	0.028564	0.000570	0.028345	0.000172	0.000000	0.028125	0.028345	0.775194
13	0.028125	-0.000225	0.028345	0.000172	0.028235	-0.000026	0.000000	0.028235	0.028345	0.389105
14	0.028235	-0.000026	0.028345	0.000172	0.028290	0.000073	0.000000	0.028235	0.028290	0.194175
15	0.028235	-0.000026	0.028290	0.000073	0.028262	0.000023	0.000000	0.028235	0.028262	0.097182
16	0.028235	-0.000026	0.028262	0.000023	0.028249	-0.000002	0.000000	0.028249	0.028262	0.048614
17	0.028249	-0.000002	0.028262	0.000023	0.028255	0.000011	0.000000	0.028249	0.028255	0.024301
18	0.028249	-0.000002	0.028255	0.000011	0.028252	0.000005	0.000000	0.028249	0.028252	0.012152

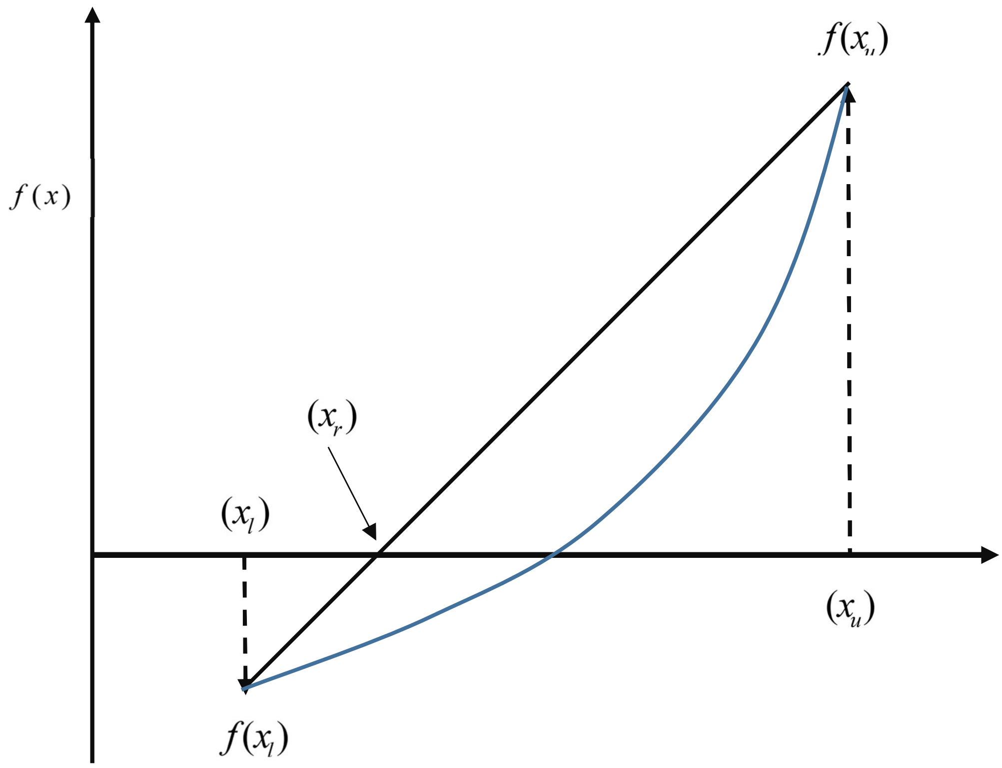
จากตารางที่ E2.2-1 พบว่า เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ต่ำกว่า 0.02% เมื่อทำการคำนวณตามระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วงในรอบที่ 18 ซึ่งพบว่า $x_r = 0.028252$ ดังนั้น สัดส่วนโมลของไฮโดรเจนเท่ากับ 0.028252 ที่คามดันรวมเป็น 3 atm และค่าคงที่ของสมดุลเท่ากับ 0.05 atm

2.4 ระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง

ระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง (False position) เป็นวิธีการที่ปรับปรุงมาจากระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง เมื่อพิจารณาจากรูปที่ 2.3 จากรูปที่ 2.3 ที่จุด x_r สามารถหาได้จากค่าความชันและสามารถเขียนได้ดังสมการ (2-7)

$$x_r = x_u - \frac{f(x_u)(x_l - x_u)}{f(x_l) - f(x_u)} \qquad (2\text{-}7)$$

และใช้วิธีการหาเช่นเดียวกับระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วง



รูปที่ 2.3 วิธีการหาค่า x_r ด้วยระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง

ที่มา: Chapra (2010)

ตัวอย่างที่ 2.3 ปฏิกิริยาการแตกตัวของน้ำกลายเป็นก๊าซไฮโดรเจนและออกซิเจนพบว่าเป็นไปตามสมการต่อไปนี้ $K = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2P}{2+x}}$ เมื่อ K คือค่าคงที่สมดุล (atm) x สัดส่วนโมลของไฮโดรเจน P ความดันร่วม (atm) ถ้ากำหนดให้ K เท่ากับ 0.05 และ P เท่ากับ 3 atm จงหาสัดส่วนโมลของไฮโดรเจนด้วยระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่งและหาเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ เมื่อทำการคำนวณ 20 รอบ

วิธีทำ

จากตัวอย่างที่ 2.2 สมการ (E2.2-2)

$$f(x) = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{6}{2+x}} - 0.05 \tag{E2.2-2}$$

ขั้นที่ 1. การทดสอบช่วงของค่า x_l และ x_u ว่ามีรากของสมการ

เมื่อ $x_l = 0$ จะได้ $f(x_l) = -0.05$ และ $x_u = 0.9$ และ $f(x_u) = 12.895509$ ซึ่งจะได้ $f(x_l)f(x_u) < 0$ แสดงว่าช่วงดังกล่าวมีรากของสมการ

ขั้นที่ 2. การหาตำแหน่ง x_r

$$x_r = 0.9 - \frac{12.895509x(0-0.9)}{-0.05-12.895509} = 0.003476$$

ขั้นที่ 3. การหาผลคูณระหว่าง $f(x_l)$ และ $f(x_r)$

$f(x_r) = -0.043963$ ซึ่ง $f(x_l)f(x_r) = 0.002198$ ซึ่งตรงกับเงื่อนไข $f(x_l)f(x_r) > 0$ ดังนั้น $x_l^{new} = 0.003476$ และ $x_u^{new} = 0.9$

รอบที่ 2

ขั้นที่ 2. การหาตำแหน่ง x_r

$$x_r = 0.9 - \frac{12.895509x(0003476 - 0.9)}{-0.043963 - 12.895509} = 0.006522$$

ขั้นที่ 3. การหาผลคูณระหว่าง $f(x_l)$ และ $f(x_r)$

$f(x_r) = -0.038648$ ซึ่ง $f(x_l)f(x_r) = 0.001699$ ซึ่งตรงกับเงื่อนไข $f(x_l)f(x_r) > 0$ ดังนั้น $x_l^{new} = 0.006522$ และ $x_u^{new} = 0.9$

$$|\varepsilon_a| = \left|\frac{x_r^{new} - x_r^{old}}{x_r^{new}}\right| x100 = \left|\frac{0.006522 - 0.003476}{0.006522}\right| x100 = 46.70\%$$

สำหรับผลการคำนวณหารากของสมการรอบต่างๆ สามารถสรุปได้ตามตารางที่ E2.2-1

ตารางที่ E2.2-1 ผลการคำนวณหารากของสมการตามระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง

รอบที่	xl	f(xl)	xu	f(xu)	xr	f(xr)	f(xr)*f(xl)	xl,new	xu,new	err
1	0.000000	-0.050000	0.900000	12.895509	0.003476	-0.043963	0.002198	0.003476	0.900000	
2	0.003476	-0.043963	0.900000	12.895509	0.006522	-0.038648	0.001699	0.006522	0.900000	46.703092
3	0.006522	-0.038648	0.900000	12.895509	0.009192	-0.033968	0.001313	0.009192	0.900000	29.044464
4	0.009192	-0.033968	0.900000	12.895509	0.011532	-0.029851	0.001014	0.011532	0.900000	20.293809
5	0.011532	-0.029851	0.900000	12.895509	0.013584	-0.026228	0.000783	0.013584	0.900000	15.105003
6	0.013584	-0.026228	0.900000	12.895509	0.015383	-0.023042	0.000604	0.015383	0.900000	11.695943
7	0.015383	-0.023042	0.900000	12.895509	0.016961	-0.020241	0.000466	0.016961	0.900000	9.302810
8	0.016961	-0.020241	0.900000	12.895509	0.018345	-0.017779	0.000360	0.018345	0.900000	7.543638
9	0.018345	-0.017779	0.900000	12.895509	0.019559	-0.015615	0.000278	0.019559	0.900000	6.206179
10	0.019559	-0.015615	0.900000	12.895509	0.020624	-0.013713	0.000214	0.020624	0.900000	5.163040
11	0.020624	-0.013713	0.900000	12.895509	0.021558	-0.012042	0.000165	0.021558	0.900000	4.333121
12	0.021558	-0.012042	0.900000	12.895509	0.022377	-0.010574	0.000127	0.022377	0.900000	3.662327
13	0.022377	-0.010574	0.900000	12.895509	0.023096	-0.009284	0.000098	0.023096	0.900000	3.113186
14	0.023096	-0.009284	0.900000	12.895509	0.023727	-0.008152	0.000076	0.023727	0.900000	2.658917
15	0.023727	-0.008152	0.900000	12.895509	0.024281	-0.007157	0.000058	0.024281	0.900000	2.279870
16	0.024281	-0.007157	0.900000	12.895509	0.024767	-0.006283	0.000045	0.024767	0.900000	1.961302
17	0.024767	-0.006283	0.900000	12.895509	0.025193	-0.005516	0.000035	0.025193	0.900000	1.691937
18	0.025193	-0.005516	0.900000	12.895509	0.025567	-0.004843	0.000027	0.025567	0.900000	1.463006
19	0.025567	-0.004843	0.900000	12.895509	0.025895	-0.004251	0.000021	0.025895	0.900000	1.267591
20	0.025895	-0.004251	0.900000	12.895509	0.026183	-0.003732	0.000016	0.026183	0.900000	1.100163

จากตารางที่ E2.2-1 พบว่า เมื่อคำนวณเป็นจำนวน 20 รอบ พบว่า $x_r = 0.026183$ ดังนั้น สัดส่วนโมลของไฮโดรเจนเท่ากับ 0.026183 ที่ความดันรวมเป็น 3 atm และค่าคงที่ของสมดุลเท่ากับ 0.05 atm เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์เท่ากับ 1.1002%

2.5 ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด

ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด (simple fixed-point iteration method) โดยระเบียบวิธีนี้เป็นการปรับสมการ $f(x)=0$ ให้อยู่ในสมการ (2-8)

$$x=g(x) \tag{2-8}$$

ดังนั้นในการคำนวณรอบแรกจำเป็นต้องเดาค่ารากของสมการ x_i แทนค่าลงในสมการ (2-8) เพื่อหาค่า x_{i+1} ดังสมการ (2-9)

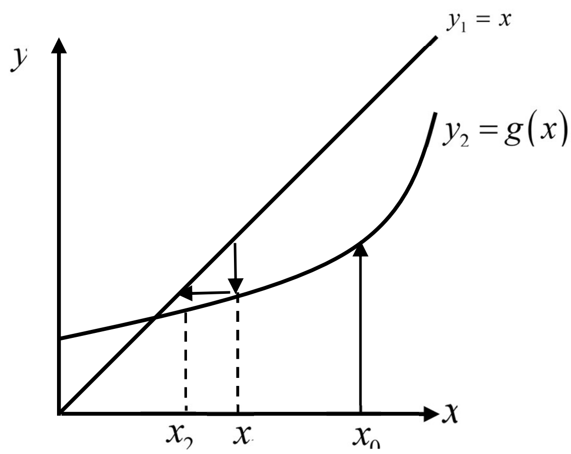
$$x_{i+1}=g(x_i) \tag{2-9}$$

และเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์สามารถหาได้ตามสมการ (2-10)

$$|\varepsilon_a|=\left|\frac{x_{i+1}-x_i}{x_{i+1}}\right|x100\% \tag{2-10}$$

ดังนั้นในการระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดจะหยุดการคำนวณเมื่อได้ค่าเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ต่ำกว่าเปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อนที่ต้องการ (ε_s)

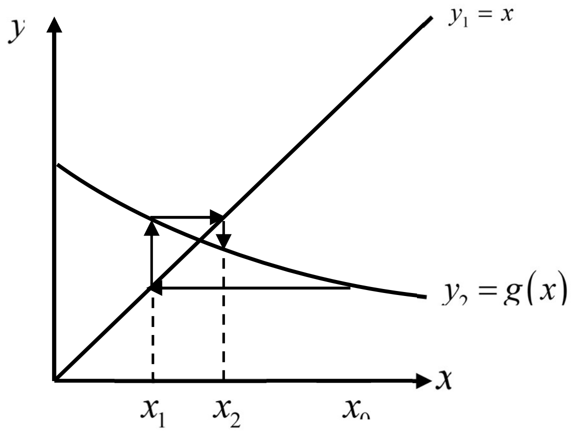
ลักษณะการลู่เข้าสู่คำตอบของระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดสามารถแบ่งออกได้เป็น 4 กรณีดังรูปที่ 2.4 จากรูปที่ 2.4 (ก) และรูปที่ 2.4 (ข) มีลักษณะการลู่เข้าสู่คำตอบ ในขณะที่รูปที่ 2.4(ค) และรูปที่ 2.4(ง) มีลักษณะการลู่ออกจากคำตอบ ดังนั้นการใช้ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดจำเป็นต้องพิจารณาลักษณะของฟังก์ชัน



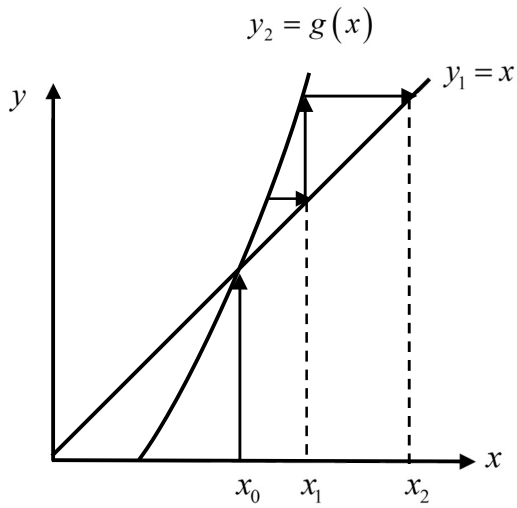
(ก)

รูปที่ 2.4 ลักษณะการลู่เข้าสู่คำตอบของระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดแบบต่างๆ

ที่มา: Chapra (2010)

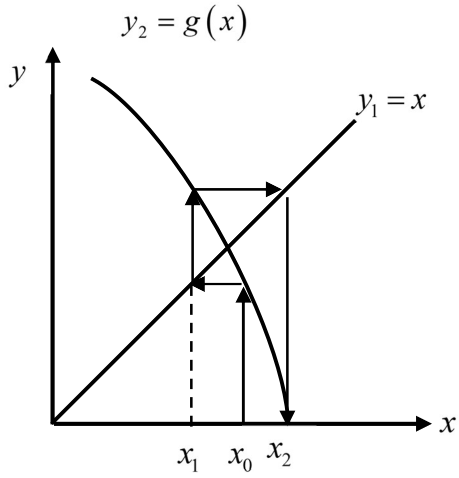


(ข)



(ค)

รูปที่ 2.4 ลักษณะการลู่เข้าสู่คำตอบของระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดแบบต่างๆ (ต่อ)



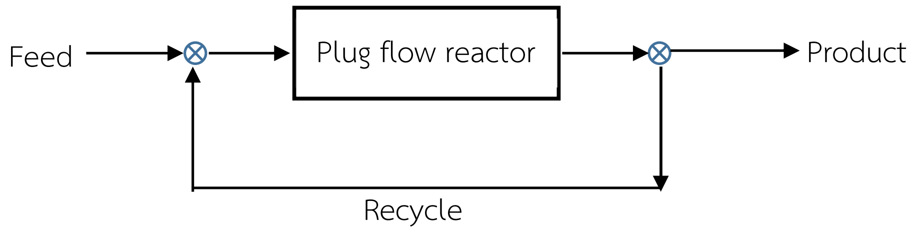
(ง)

รูปที่ 2.4 ลักษณะการลู่เข้าสู่คำตอบของระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดแบบต่างๆ (ต่อ)

ตัวอย่างที่ 2.4 เครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลที่มีการป้อนสารย้อนกลับ ที่อัตราส่วนการป้อนกลับเท่ากับ R ดังรูปที่ E2.3-1 ซึ่งสามารถหาคอนเวอร์ชันของสาร A ที่ทางออก (x_A) ได้ดังสมการ (E2.4-1)

$$\ln\left[\frac{1+R(1-x_A)}{R(1-x_A)}\right] = \frac{R+1}{R\left[1+R(1-x_A)\right]} \tag{E2.4-1}$$

จงหาคอนเวอร์ชันของสาร A ที่ทางออก เมื่ออัตราส่วนการป้อนกลับเท่ากับ 10 ด้วยระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด



รูปที่ E2.3-1 การป้อนย้อนกลับในเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล

ที่มา :

วิธีทำ

จัดรูปสมการ (E2.4-1) โดยแทนค่าอัตราส่วนการป้อนกลับเท่ากับ 10 ดังสมการ (E2.4-2)

$$\ln\left[\frac{1+10(1-x_A)}{10(1-x_A)}\right] = \frac{10+1}{10\left[1+10(1-x_A)\right]}$$

$$\ln\left[\frac{11-10x_A}{10-10x_A}\right] = \frac{11}{110-100x_A} \tag{E2.4-2}$$

ให้อยู่ในรูป $x_{i+1} = g(x_i)$ จะได้เป็นสมการ (E2.4-2)

$$110-100x_A = 11\ln\left[\frac{10-10x_A}{11-10x_A}\right] \text{หรือ} 100x_A = 110-11\ln\left[\frac{10-10x_A}{11-10x_A}\right]$$

$$x_A = 1.10-(0.11)\ln\left[\frac{10-10x_A}{11-10x_A}\right]$$

$$x_{A,i+1} = 1.10-(0.11)\ln\left[\frac{10-10x_{A,i}}{11-10x_{A,i}}\right] \quad \text{(E2.4-2)}$$

รอบที่ 1 กำหนดให้ค่าเริ่มต้นของ $x_{A,0}=0.05$ แทนค่าลงในสมการ (E2.4-2)

$$x_{A,1} = 1.10-(0.11)\ln\left[\frac{10-10(0.05)}{11-10(0.05)}\right] = 1.11101$$

รอบที่ 2 นำค่า ความเข้มข้น $x_{A,1}=1.11101$ แทนค่าลงในสมการ (E2.4-2)

$$x_{A,2} = 1.10-(0.11)\ln\left[\frac{10-10(1.11101)}{11-10(1.11101)}\right] = 0.84580$$

ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (ε_a)

$$|\varepsilon_a| = \left|\frac{x_{A,i+1}-x_{A,i}}{x_{A,i+1}}\right| = \left|\frac{0.84580-1.11101}{0.84580}\right| x100 = 0.05801\%$$

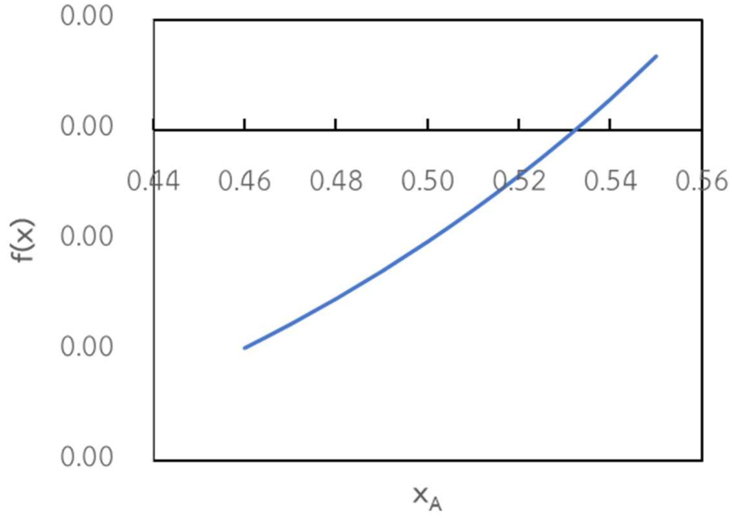
ผลการคำนวณการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดและค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์สามารถสรุปผลการคำนวณดังตารางที่ E2.4-1 จากตารางที่ E2.4-1 จะเห็นว่าค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์มีค่าไม่ลดลง แสดงว่าสมการอาจไม่เหมาะสมกับการแก้สมการด้วยวิธีการคำนวณการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด

ตารางที่ E2.4-1 ผลการคำนวณการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด

$x_{A,i}$	$x_{A,i+1}$	$\lvert x_{A,i+1}-x_{A,i}\rvert$	$\lvert\varepsilon_a\rvert$
0.05	1.11101	1.06101	95.50%
1.11101	0.84580	0.26521	31.36%
0.84580	1.15499	0.30918	26.77%
1.15499	0.98601	0.16897	17.14%
0.98601	1.33077	0.34476	25.91%
1.33077	1.06040	0.27037	25.50%

ดังนั้นจึงใช้วิธีการเขียนกราฟเพื่อหาค่าคำตอบดังสมการ (E2.4-3) และให้ผลดังรูปที่ E2.4-1 จากรูปที่ E2.4-1 พบว่าค่าคอนเวอร์ชันของสาร A ที่ทางออกเท่ากับ 0.53

$$f(x_A) = \ln\left[\frac{11-10x_A}{10-10x_A}\right] - \frac{11}{110-100x_A} \quad \text{(E2.4-3)}$$



รูปที่ E2.3-1 ผลการคำนวณด้วยวิธีการเขียนกราฟ

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 3

หัวข้อการสอน

บทที่ 2 การหารากของสมการ ในหัวข้อ 2.5 – 2.7

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุดในการหารากของสมการ
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันในการหารากของสมการ
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีซีแคนในการหารากของสมการ

เนื้อหา

1. ระเบียบวิธีการทำซ้ำแบบหนึ่งจุด
2. ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน

3 ระเบียบวิธีซีแคน

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 2 การหารากของสมการ (ต่อ)

2.5 ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน

ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson method) เป็นวิธีที่ใช้สำหรับหาค่ารากสมการโดยอาศัยการกำหนดหรือเดาค่าเริ่มต้นเพียงจุดเดียว ดังนั้นถ้าเลือกค่าเริ่มต้นได้เหมาะสม จะสามารถหาคำตอบได้เร็วขึ้น เมื่อเทียบกับระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วงและระเบียบวิธีวางผิดตำแหน่ง

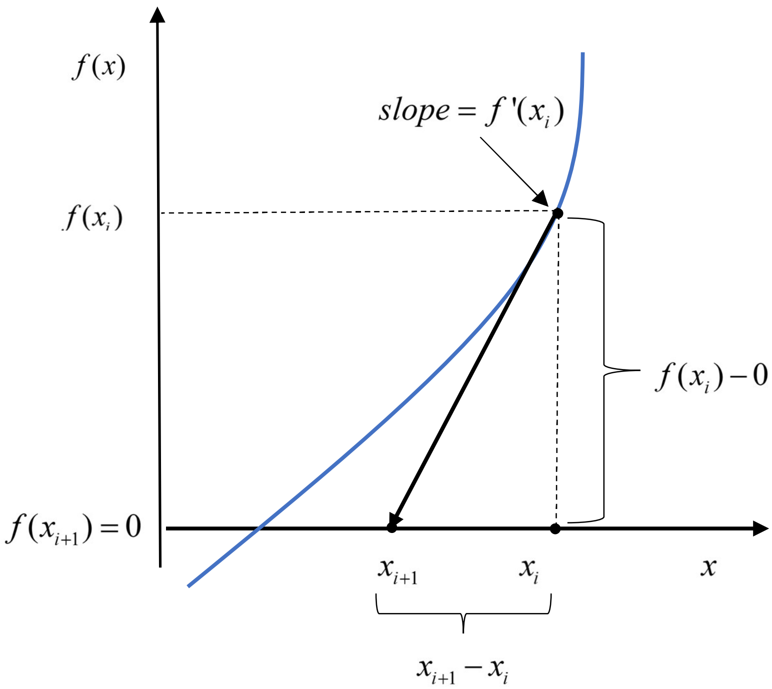
สำหรับหลักการของระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันสามารถแสดงได้ดังรูปที่ 2.5 จากรูปที่ 2.5 พบว่าระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันอาศัยการหาค่าของอนุพันธ์อันดับหนึ่งหรือค่าความชันของสมการนั้นที่จุดดังกล่าว จากรูปที่ 2.5 ถ้าเริ่มต้นที่จุด $x = x_i$ ดังนั้น $y = f(x_i)$ ถ้าลากเส้นต้นที่มีความชันที่จุดดังกล่าวไปตัดกับแกน x ซึ่งจะได้เป็นจุดที่ได้ค่าของ $y = 0$ และ $x = x_{i+1}$ ซึ่งสามารถเขียนสมการแสดงค่าความชันได้ดังสมการ (2-11)

$$f'(x_i) = \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \frac{0 - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \qquad (2\text{-}11)$$

จัดรูปสมการ (2-11) เพื่อหาค่าของ x_{i+1} ได้เป็นสมการ (2-12)

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \qquad (2\text{-}12)$$

ดังนั้นระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันหยุดการคำนวณเมื่อค่าของ $f(x_{i+1})$ มีค่าเท่ากับ 0 หรือใกล้เคียง 0



รูปที่ 2.5 รูปประกอบหลักการของระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน

ที่มา: Chapra (2010)

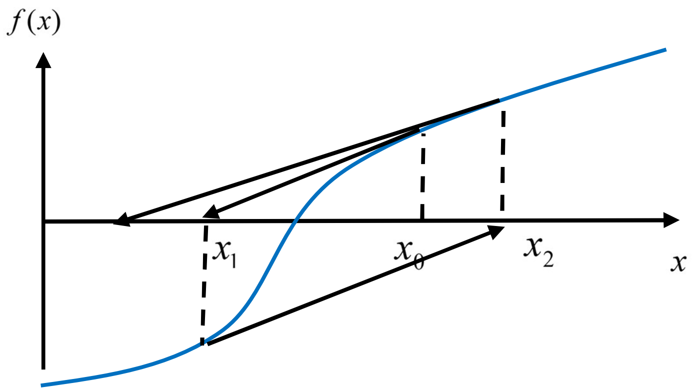
ลักษณะกราฟของฟังก์ชันดังรูปที่ 2.6 เป็นลักษณะของกราฟที่ไม่สามารถใช้ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันได้ในการหารากของสมการได้สามารถสรุปได้ดังนี้

กรณีที่ 1 ความชันของกราฟมีค่าเข้าใกล้ 0 ดังนั้นทำให้ค่าของ $f'(x_i)$ ซึ่งเป็นตัวหารในสมการ (2-12) มีค่าเข้าใกล้ 0 ส่งผลให้ไม่สามารถหาค่าของ x_{i+1} ได้ ดังแสดงในรูปที่ 2.6 (ก)

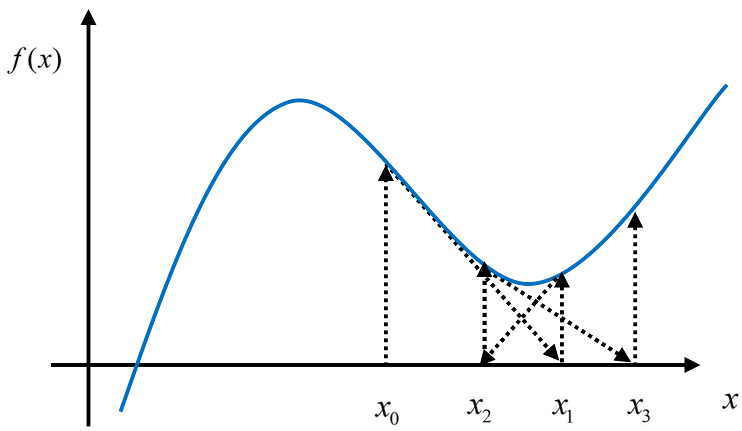
กรณีที่ 2 จุดที่กำหนดค่า $x = x_i$ เริ่มต้นอยู่ใกล้จุดสูงสุดหรือจุดต่ำสุด ทำให้การหาค่าของ x_{i+1} จะอยู่ใกล้กับจุดดังกล่าว ดังแสดงในรูปที่ 2.6 (ข)

กรณีที่ 3 จุดที่กำหนดค่า $x = x_i$ เริ่มต้นอยู่ระหว่างรากของสมการ 2 ค่า ทำให้การหาค่าของ x_{i+1} จะคำนวณได้ห่างจากรากของสมการออกไป ดังแสดงในรูปที่ 2.6 (ค)

กรณีที่ 4 จุดที่กำหนดค่า $x = x_i$ เริ่มต้นอยู่ใกล้กับจุดที่ความชันเท่ากับ 0 ทำให้การหาค่าของ x_{i+1} จะคำนวณได้จะได้ค่าที่หาค่าไม่ได้และไกลออกจากกรากของสมการ ดังแสดงในรูปที่ 2.6 (ง)



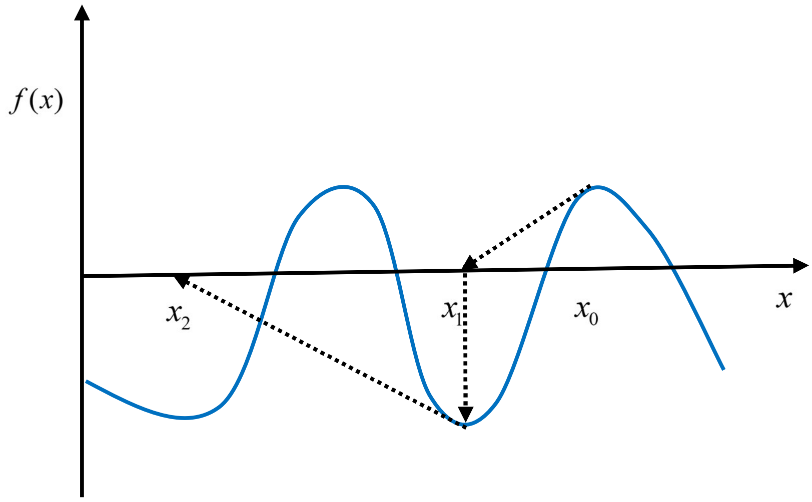
(ก)



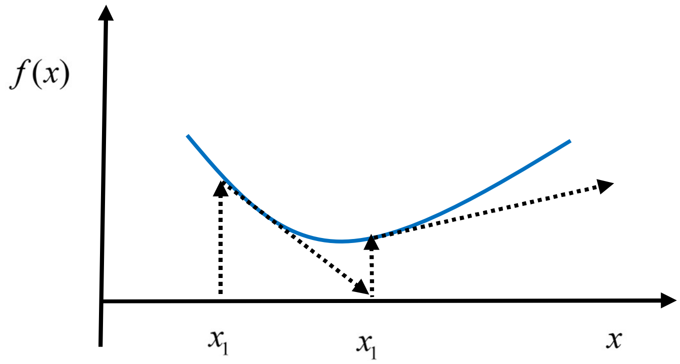
(ข)

รูปที่ 2.6 ลักษณะของฟังก์ชันที่ไม่สามารถใช้ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันได้

ที่มา: Chapra (2010)



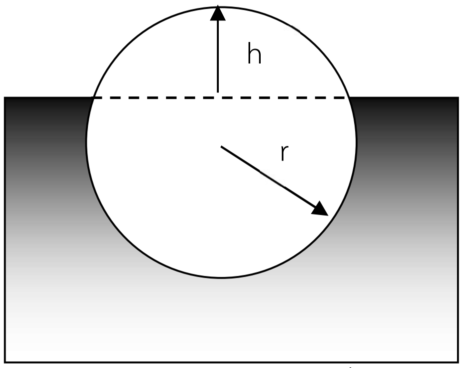
(ค)



(ง)

รูปที่ 2.6 ลักษณะของฟังก์ชันที่ไม่สามารถใช้ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันได้ (ต่อ)

ตัวอย่างที่ 2.5 วัตถุทรงกลมมีขนาดรัศมีเท่ากับ 1 m และมีความหนาแน่นเท่ากับ 200 kg/m^3 เมื่อนำวัตถุทรงกลมนี้ไปลอยในของเหลวที่มีความหนาแน่น 1000 kg/m^3 ปริมาตรของวัตถุทรงกลมส่วนที่ลอยพ้นของเหลวสามารถคำนวณหาได้จาก $V = \frac{\pi h^2}{3}\left(3r - h\right)$ เมื่อ V คือปริมาตรของวัตถุที่ลอยพ้นเหนือของเหลว (m^3) r คือรัศมีของวัตถุทรงกลม (m) และ h คือความสูงของวัตถุทรงกลมที่ลอยพ้นผิวของเหลว (m) ดังรูปที่ E2.5-1 และจากกฎของอาร์คิมีดีสซึ่งกล่าวถึงกฎการลอยตัวของวัตถุ ดังสมการต่อไปนี้ $\rho_{ob}V_{ob} = \rho_l V_l$ เมื่อ ρ_{ob} คือความหนาแน่นของวัตถุ (kg/m^3) ρ_l คือความหนาแน่นของของเหลว (kg/m^3) V_{ob} คือปริมาตรของวัตถุ (m^3) และ V_l คือปริมาตรของวัตถุที่จมในของเหลว (m^3) จงหาความความสูงของวัตถุทรงกลมที่ลอยพ้นผิวของของเหลวด้วยระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน



รูปที่ E2.5-1 ระดับความสูงของวัตถุทรงกลมที่ลอยพ้นผิวของของเหลว

วิธีทำ

จากกฎของอาร์คิมีดีส $\rho_{ob}V_{ob} = \rho_l V_l$

เมื่อ

$$V_{ob} = V_{sphere} = \frac{4}{3}\pi r^3$$

$$V_l = V_{ob} - V_{ob,float} = \frac{4}{3}\pi r^3 - \frac{\pi h^2}{3}(3r-h)$$

แทนค่าลงในกฎของอาร์คิมีดีส

$$\rho_{ob}\frac{4}{3}\pi r^3 = \rho_l\left(\frac{4}{3}\pi r^3 - \frac{\pi h^2}{3}(3r-h)\right)$$

จัดรูปของสมการใหม่

$$\frac{4}{3}\pi r^3\left(\rho_l - \rho_{ob}\right) = \rho_l\left(\pi r h^2 - \frac{\pi h^3}{3}\right)$$

หรือ

$$4r^3\left(\rho_l - \rho_{ob}\right) = \rho_l\left(3rh^2 - h^3\right)$$

ดังนั้นสมการสำหรับหารากของฟังก์ชันนี้

$$f(h) = \rho_l\left(3rh^2 - h^3\right) - 4r^3\left(\rho_l - \rho_{ob}\right)$$

แทนค่า วัตถุทรงกลมมีรัศมีเท่ากับ 1 m ความหนาแน่นของวัตถุเท่ากับ 200 kg/m^3 ความหนาแน่นของของเหลวเท่ากับ 1000 kg/m^3

$$f(h) = \rho_l\left(3rh^2 - h^3\right) - 4r^3\left(\rho_l - \rho_{ob}\right) = 1000\left(3x1xh^2 - h^3\right) - 4x1^3\left(1000-200\right)$$

$f(h) = 1000\left(3h^2 - h^3\right) - 3200$ หรือ $f(h) = h^3 - 3h^2 + 3.2$

เมื่อใช้ระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน จากสมการ (2.12) ได้เป็นสมการ (E2.4-1)

$$h_{i+1} = h_i - \frac{f(h_i)}{f'(h_i)} \qquad \text{(E2.5-1)}$$

เมื่อ $f(h) = h^3 - 3h^2 + 3.2$ และ $f'(h) = 3h^2 - 6h$

$$h_{i+1} = h_i - \frac{h_i^3 - 3h_i^2 + 3.2}{3h_i^2 - 6h_i}$$

รอบที่ 1 สมมุติให้ความสูงของวัตถุทรงกลมที่ลอยพ้นผิวของของเหลว h_0 เท่ากับ 1 m

$$h_1 = h_0 - \frac{h_0^3 - 3h_0^2 + 3.2}{3h_0^2 - 6h_0} = 1 - \frac{1^3 - 3x1^2 + 3.2}{3x1^2 - 6x1} = 1.400$$

รอบที่ 2 จากรอบที่ 1 คำนวณได้ความสูงเหนือระดับน้ำ h_1 เท่ากับ 1.400 m

$$h_2 = h_1 - \frac{h_1^3 - 3h_1^2 + 3.2}{3h_1^2 - 6h_1} = 1.4 - \frac{1.4^3 - 3x1.4^2 + 3.2}{3x1.4^2 - 6x1.4} = 1.425$$

รอบที่ 3 จากรอบที่ 2 คำนวณได้ความสูงเหนือระดับน้ำ h_1 เท่ากับ 1.425 m

$$h_3 = h_2 - \frac{h_2^3 - 3h_2^2 + 3.2}{3h_2^2 - 6h_2} = 1.425 - \frac{1.425^3 - 3x1.425^2 + 3.2}{3x1.425^2 - 6x1.425} = 1.425$$

ดังนั้น ความสูงของวัตถุทรงกลมที่ลอยพ้นผิวของของเหลวคือ 1.425 m

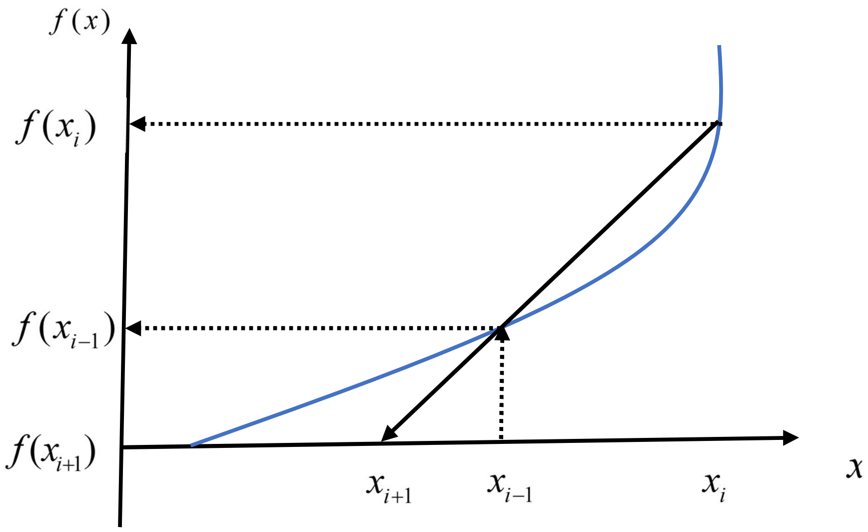
2.7 ระเบียบวิธีซีแคน

ระเบียบวิธีซีแคน (The Secant Method) เป็นระเบียบวิธีที่ดัดแปลงมากจากระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสัน เนื่องจากระเบียบวิธีนิวตัน-ราฟสันจำเป็นต้องหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันให้ได้ ดังนั้นถ้าฟังก์ชันดังกล่าวหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งได้ยาก ดังนั้นระเบียบวิธีซีแคนจึงได้ใช้การประมาณค่าหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชัน ดังแสดงในรูปที่ 2.7 ถ้าใช้วิธีการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันด้วยวิธีผลต่างย้อนกลับ (backward finite divided difference) ดังสมการ (2-13)

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i} \tag{2-13}$$

ดังนั้นแทนค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งจากสมการ (2-13) ลงในสมการ (2-12) จะได้เป็นสมการ (2-14)

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{\left(\dfrac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}\right)} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)} \tag{2-14}$$



รูปที่ 2.7 รูปประกอบหลักการของระเบียบวิธีซีแคน

ที่มา: Chapra (2010)

การหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันเพื่อให้ได้ใกล้เคียงกับค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันที่แท้จริงสามารถทำได้โดยการให้ระยะห่างระหว่างจุด x_{i-1} และ x_i ให้มีค่าสุดเท่าที่เป็นไปได้ หรือ $x_{i-1} = x_i + \delta x_i$ แทนค่าลงในสมการ (2-13) ได้เป็นสมการ (2-15)

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_i + \delta x_i) - f(x_i)}{\delta x_i} \tag{2-14}$$

หรือ

$$x_{i+1} = x_i - \frac{\delta x_i f(x_i)}{f(x_i + \delta x_i) - f(x_i)} \tag{2-15}$$

ดังนั้นสมการ (2-15) เรียกว่าระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุง

ตัวอย่างที่ 2.6 อัตราการไหลเชิงปริมาตรของน้ำที่ไหลผ่านคลองเปิดรูปร่างสี่เหลี่ยมสามารถหาได้จากสมการของ Manning ดังสมการ (E-2.6-1) เมื่อ Q คืออัตรการไหลเชิงปริมาตรของน้ำ (m^3/s) S คือความลาดชันของคอง (m/m) H คือความลึกของคลอง (m) และ B คือความกว้างของคลอง (m) เมื่อ n คือสัมประสิทธิ์ความขรุขระของแมนนิ่ง จงหาความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยม เพื่อลำเลียงน้ำที่อัตราการไหลเชิงปริมาตรเท่ากับ 10 m^3/s เมื่อความชันของรางน้ำเท่ากับ 0.002 ค่าสัมประสิทธิ์ความขรุขระของแมนนิ่งเท่ากับ 0.03 และความกว้างของรางน้ำ 10 m ด้วยระเบียบวิธีซีแคนและระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุงเมื่อ δ เท่ากับ 0.001

$$Q = \frac{\sqrt{S}}{n}\frac{(BH)^{5/3}}{(B+2H)^{2/3}} \tag{E-2.6-1}$$

วิธีทำ

ดังนั้นเพื่อหารากของสมการจึงจัดรูปสมการ (E-2.5-1) เพื่อหารากของสมการได้เป็นสมการ (E-2.6-2)

$$f(H)=\frac{\sqrt{S}}{n}\frac{(BH)^{\frac{5}{3}}}{(B+2H)^{\frac{2}{3}}}-Q \qquad \text{(E-2.6-2)}$$

เนื่องจากโจทย์กำหนดให้ อัตราการไหลเชิงปริมาตรเท่ากับ 10 m^3/s เมื่อความชันของรางน้ำเท่ากับ 0.002 ค่าสัมประสิทธิ์ความขรุขระของแมนนิ่ง เท่ากับ 0.03 และความกว้างของรางน้ำ 10 m

แทนค่า

$$f(H)=\frac{\sqrt{0.002}}{0.03}\frac{(10H)^{\frac{5}{3}}}{(10+2H)^{\frac{2}{3}}}-10=1.491\left(\frac{(10H)^{\frac{5}{3}}}{(10+2H)^{\frac{2}{3}}}\right)-10$$

1. เมื่อคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคนในการ

จากระเบียบวิธีซีแคนดังสมการ (E-2.6-3)

$$H_{i+1}=H_i-\frac{f(H_i)\cdot(H_{i-1}-H_i)}{f(H_{i-1})-f(H_i)} \qquad \text{(E-2.6-3)}$$

รอบที่ 1 สมมุติให้ความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยม H_0 เท่ากับ 0 m และ H_1 เท่ากับ 0.5 m

$$H_2=H_1-\frac{f(H_1)\cdot(H_0-H_1)}{f(H_0)-f(H_1)}$$

เมื่อ $f(H_0)=1.491\left(\frac{(10x0)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0)^{\frac{2}{3}}}\right)-10=-10$

$$f(H_1)=1.491\left(\frac{(10x0.5)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0.5)^{\frac{2}{3}}}\right)-10=-5.7222$$

ดังนั้น $H_2=0.5-\frac{(-5.7222)(0-0.5)}{(-5.7222)-(-10.0000)}=1.1688$

รอบที่ 2 จากการคำนวณรอบที่ 1 เมื่อ H_1 เท่ากับ 1 m และ H_2 เท่ากับ 1.1688 m

$$H_3=H_2-\frac{f(H_2)(H_1-H_2)}{f(H_1)-f(H_2)}$$

เมื่อ $f(H_2)=1.491\left(\frac{(10x1.16888)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x1.1688)^{\frac{2}{3}}}\right)-10=227.3860$

ดังนั้น $H_3=1.1688-\frac{(227.3860)(0.5-1.1688)}{(-5.7222)-(227.3860)}=0.5164$

ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคนสามารถสรุปผลการตำนวณได้ตามตารางที่ E2.6-1 จากตารางที่ E2.6-1 พบว่าเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 8 ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (ε_a) มีค่า 0.00% ซึ่งได้ความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยมเท่ากับ 0.5967 m

ตารางที่ E2.6-1 ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคน

H_{i-1}	H_i	$f(H_{i-1})$	$f(H_i)$	H_{i+1}	$\lvert\varepsilon_a\rvert$
0.0000	0.5000	-10.0000	-5.7222	1.1688	
0.5000	1.1688	-5.7222	227.3860	0.5164	126.34%
1.1688	0.5164	227.3860	-5.0021	0.5305	2.65%
0.5164	0.5305	-5.0021	-4.3136	0.6184	14.23%
0.5305	0.6184	-4.3136	1.8672	0.5919	4.49%
0.6184	0.5919	1.8672	-0.3821	0.5964	0.76%
0.5919	0.5964	-0.3821	-0.0257	0.5967	0.05%
0.5964	0.5967	-0.0257	0.0004	0.5967	0.00%

2. เมื่อคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุง

จากระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุงดังสมการ (E-2.6-4)

$$H_{i+1} = H_i - \frac{\delta H_i f(H_i)}{f(H_i + \delta H_i) - f(H_i)} \qquad \text{(E-2.6-4)}$$

เมื่อ δ เท่ากับ 0.001 ดังนั้นสมการ (E-2.5-4) ได้เป็น (E-2.5-5)

$$H_{i+1} = H_i - \frac{0.001 H_i f(H_i)}{f(H_i + 0.001 H_i) - f(H_i)}$$

รอบที่ 1 สมมุติให้ความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยม H_0 เท่ากับ 0.5 m

$$H_1 = H_0 - \frac{0.001 H_0 f(H_0)}{f(H_0 + 0.001 H_0) - f(H_0)}$$

เมื่อ $f(H_0) = 1.491\left(\dfrac{(10x0.5)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0.5)^{\frac{2}{3}}}\right) - 10 = -5.7222$

$$f(H_0 + 0.001 H_0) = 1.491\left(\frac{(10x0.5005)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0.5005)^{\frac{2}{3}}}\right) - 10 = -5.7016$$

ดังนั้น $H_1 = 0.5 - \dfrac{0.001x0.5x(-5.7222)}{(-5.7016)-(-5.7222)} = 0.7771$

รอบที่ 2 จากการคำนวณรอบที่ 1 ได้ H_1 เท่ากับ 0.7771 m

$$H_2 = H_1 - \frac{0.001 H_1 f(H_1)}{f(H_1 + 0.001 H_1) - f(H_1)}$$

เมื่อ $f(H_1) = 1.491\left(\dfrac{(10x0.7771)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0.7771)^{\frac{2}{3}}}\right) - 10 = 25.1618$

$$f(H_1 + 0.001H_1) = 1.491\left(\frac{(10x0.7779)^{\frac{5}{3}}}{(10+2x0.7779)^{\frac{2}{3}}}\right) - 10 = 25.3285$$

ดังนั้น $H_2 = 0.7771 - \dfrac{0.001x0.7771x25.1618}{25.3285 - 25.1618} = 0.6261$

ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุงสามารถสรุปผลการตำนวณได้ตามตารางที่ E2.6-2 จากตารางที่ E2.6-2 พบว่าเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 21 ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (ε_a) มีค่า 0.00% ซึ่งได้ความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยมเท่ากับ 0.5967 m เช่นกัน

ตารางที่ E2.6-2 ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีซีแคนปรับปรุง

H_i	$H_{i+\delta}$	$f(H_i)$	$f(H_{i+\delta})$	H_{i+1}	$\lvert\varepsilon_a\rvert$
0.5000	0.5005	-5.7222	-5.7016	0.7771	
0.7771	0.7779	25.1618	25.3285	0.6261	24.11%
0.6261	0.6268	2.5886	2.6489	0.5832	7.37%
0.5832	0.5837	-1.0406	-0.9976	0.6074	3.98%
0.6074	0.6080	0.8843	0.9365	0.5904	2.87%
0.5904	0.5910	-0.4949	-0.4493	0.6013	1.81%
0.6013	0.6019	0.3711	0.4208	0.5938	1.26%
0.5938	0.5944	-0.2308	-0.1839	0.5987	0.82%
0.5987	0.5993	0.1632	0.2120	0.5954	0.56%
0.5954	0.5960	-0.1061	-0.0586	0.5976	0.37%
0.5976	0.5982	0.0730	0.1213	0.5961	0.25%
0.5961	0.5967	-0.0483	-0.0006	0.5971	0.17%
0.5971	0.5977	0.0329	0.0810	0.5964	0.11%
0.5964	0.5970	-0.0220	0.0259	0.5969	0.08%
0.5969	0.5975	0.0148	0.0629	0.5966	0.05%
0.5966	0.5972	-0.0100	0.0380	0.5968	0.03%

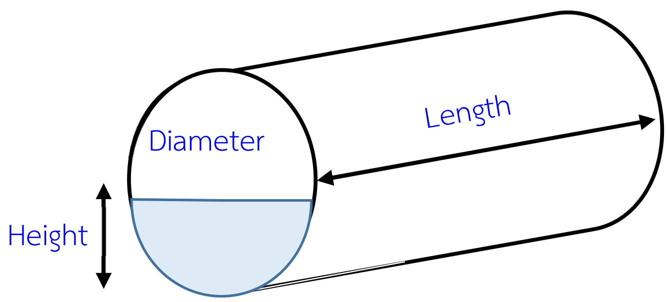
H_i	$H_{i+\delta}$	$f(H_i)$	$f(H_{i+\delta})$	H_{i+1}	$\left\|\varepsilon_a\right\|$
0.5968	0.5974	0.0067	0.0547	0.5966	0.02%
0.5966	0.5972	-0.0045	0.0434	0.5967	0.02%
0.5967	0.5973	0.0030	0.0510	0.5967	0.01%
0.5967	0.5973	-0.0020	0.0459	0.5967	0.01%
0.5967	0.5973	0.0014	0.0493	0.5967	0.00%

2.7 แบบฝึกหัด

HM2.1 ถังทรงกระบอกที่วางในแนวนอน ดังรูปที่ HM2.1-1 พบว่าปริมาตรของของเหลวสามารถคำนวณได้ตามสมการ (HM2.1-1) เมื่อ V คือปริมาตรของของเหลวในถัง (m^3) r รัศมีของถัง (m) L คือความยาวของถัง และ h คือระดับความสูงของของเหลวภายในถัง

$$V = \left(r^2 \cos^{-1}\left(\frac{r-h}{h}\right) - (r-h)\sqrt{2rh-h^2} \right) L \qquad \text{(HM2.1-1)}$$

จงหาระดับความสูงของของเหลวภายในถัง เมื่อ ปริมาตรของของเหลวในถังเท่ากับ 20 m^3 รัศมีของถังเท่ากับ 2 m และความยาวของถังเท่ากับ 10 m ด้วยระเบียบวิธีการต่างๆ (คำตอบ 1.21630 m)



รูปที่ HM2.1-1 รูปร่างของถังทรงกระบอกที่วางในแนวนอน

HM2.2 ปฏิกิริยาผันกลับได้ของ $2A + B \rightleftharpoons C$ พบว่าค่าคงที่ของสมดุลสามารถหาได้จากสมการ (HM2.2-1) ดังนี้

$$K = \frac{C_C}{C_A^2 C_B} \qquad \text{(HM2.2-1)}$$

เมื่อ K K คือค่าคงที่ของสมดุล (L^2/mol^2) และ C_A, C_B, C_C เป็นความเข้มข้นของสาร A B และ C ตามลำดับ และมีหน่วยเป็น mol/L เมื่อแทนความเข้มข้นของสาร A B และ C ให้อยู่ในรูปคอนเวอร์ชันของสาร B (x_B) พบว่าสามารถเขียนความเข้มข้นของสารต่างๆ ได้ดังนี้

$$C_A = C_{A0} - 2x_B C_{B0}$$
$$C_B = C_{B0} - x_B C_{B0}$$
$$C_C = C_{C0} - x_B C_{B0}$$

เมื่อ C_{A0}, C_{B0}, C_{C0} เป็นความเข้มข้นของสาร A B และ C ที่เวลาเริ่มต้น ตามลำดับ

เมื่อแทนค่าความเข้มข้นของสารต่างๆ ลงในสมการ (HM2.2-1) ได้เป็นสมการ (HM2.2-2)

$$K = \frac{C_C}{C_A^2 C_B} = \frac{C_{C0} + x_B C_{B0}}{\left(C_{A0} - 2x_B C_{B0}\right)^2 \left(C_{B0} - x_B C_{B0}\right)} \qquad \text{(HM2.2-2)}$$

จงหาคอนเวอร์ชันของสาร B ถ้าความเข้มข้นของสาร A B และ C ที่เวลาเริ่มต้นมีค่าเท่ากับ 40 20 และ 5 mol/L ตามลำดับ และค่าคที่ของสมดุลมีค่าเท่ากับ 0.02

HM2.3 ค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานภายในท่อสามารถหาได้จากสูตรของ Colebrook สำหรับ $\mathrm{Re} > 4,000$ ดังสมการ (HM2.3-1)

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4\log\left[\frac{\varepsilon}{3.7D} + \frac{1.256}{\mathrm{Re}\sqrt{f}}\right] \qquad \text{(HM2.3-1)}$$

เมื่อ f คือค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานภายในท่อ D คือเส้นผ่านศูนย์กลางภายในท่อ (m) ε เป็นความขุขระของผิวท่อ (m) และ Re คือค่าเรโนลย์ ซึ่งสามารถหาได้จากสมการ (HM2.3-2)

$$\mathrm{Re} = \frac{\rho D u}{\mu} \qquad \text{(HM2.3-2)}$$

เมื่อ ρ คือความหนาแน่นของของไหล (kg/m^3) u คือความเร็วของของไหลที่ไหลภายในท่อ (m/s) และ μ คือค่าความหนืดของของไหล (Pa-s หรือ kg/s-m หรือ N-s/m^2) จงหาค่าสัมประสิทธิ์แรงเสียดทานภายในท่อ เมื่อความหนาแน่นของของไหลเท่ากับ 1.23 kg/m^3 ความหนืดของของไหลเท่ากับ 1.79x10^5 kg/s-m เส้นผ่านศูนย์กลางภายในท่อเท่ากับ 0.005 m ความเร็วของของไหลที่ไหลภายในท่อเท่ากับ 40 m/s และความขุขระของผิวท่อเท่ากับ 0.0015 mm

HM2.4 ปริมาตรจำเพาะของก๊าซที่ความดันต่างๆ สามารถหาได้จากสมการสภาวะ (Equation of State) ของ Redlich-Kwong ดังสมการ (HM2.4-1)

$$P = \frac{RT}{\overline{V} - b} - \frac{a}{\overline{V}\left(\overline{V} + b\right)\sqrt{T}} \qquad \text{(HM2.4-1)}$$

เมื่อ P คือความดัน (kPa) $\overline{V}$ คือปริมาตรจำเพาะ (m^3/kg) T คืออุรหภูมิ (K) และ R คือค่าคงที่ของก๊าซมีค่าเท่ากับ 0.518 kJ/kg-K เมื่อ a และ b เป็นค่าคงที่ของก๊าซ โดยสามารถคำนวณหาค่า a และ b จากสมการ (HM2.4-2)

$$a = 0.427\frac{R^2 T_c^{2.5}}{P_c} \text{ และ } b = 0.0866\frac{RT_c}{P_c} \qquad \text{(HM2.4-2)}$$

เมื่อ T_c .คืออุณหภูมิวิกฤติของก๊าซชนิดนั้น (K) และ P_c คือความดันวิกฤติของก๊าซชนิดนั้น (kPa)

จงหาน้ำหนักของก๊าซมีเทนในถังขนาด 3 m^3 ที่ความดัน 65000 kPa และอุณหภูมิ 223 K เมื่ออุณหภูมิวิกฤติและความดันวิกฤติของก๊าซมีเทนเท่ากับ 191 K และ 4600 kPa ตามลำดับ

HM2.5 ปฏิกิริยาการย่อยคาร์โบไฮเดรตด้วยเอนไซม์อะไมเลสสามารถเขียนเป็นสมการ (HM2.5-1) ดังนี้

$$S = S_0 - V_{\max} t + K_m \ln\left(\frac{S_0}{S}\right) \qquad \text{(HM2.5-1)}$$

เมื่อ S_0 และ S เป็นความเข้มข้นของคาร์โบไฮเตรดที่เวลาเริ่มต้นและที่เวลาใดๆ (t) มีหน่วยเป็น g/L $V_{\max}$ คือ อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดที่เกิดขึ้น (g/L-min) และ K_m คือความเข้มข้นของสารตั้งต้นในขณะที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นครึ่งหนึ่งของอัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุด (g/L) จงหาความเข้มข้นของแป้งที่เหลือในสารละลายเมื่อเวลาผ่านไป 30 min เมื่อใช้เอนไซม์แอลฟาอะไมเลสที่ความเข้มข้น 0.1% v/v ความเข้มข้นเริ่มต้นของแป้งเป็น 20 g/L อัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดที่เกิดขึ้นเท่ากับ 5400 g/L-min และความเข้มข้นของสารตั้งต้นในขณะที่อัตราการเกิดปฏิกิริยาเป็นครึ่งหนึ่งของอัตราการเกิดปฏิกิริยาสูงสุดเท่ากับ 17 g/L

2.8 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. H. Scott Fogler, Elements of Chemical Reaction Engineering (Fifth Edition), Pearson Education, 2016

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 4

หัวข้อการสอน

บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่ต้องการหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาค่าสูงสุด-ต่ำสุดด้วยวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาค่าสูงสุด-ต่ำสุดด้วยวิธีการประมาณค่ากำลังสอง
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาค่าสูงสุด-ต่ำสุดด้วยวิธีนิวตัน

เนื้อหา

1. อธิบายเกี่ยวกับปัญหาที่ต้องการหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด

2 วิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ

3 วิธีการประมาณค่ากำลังสอง

4 วิธีนิวตัน

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

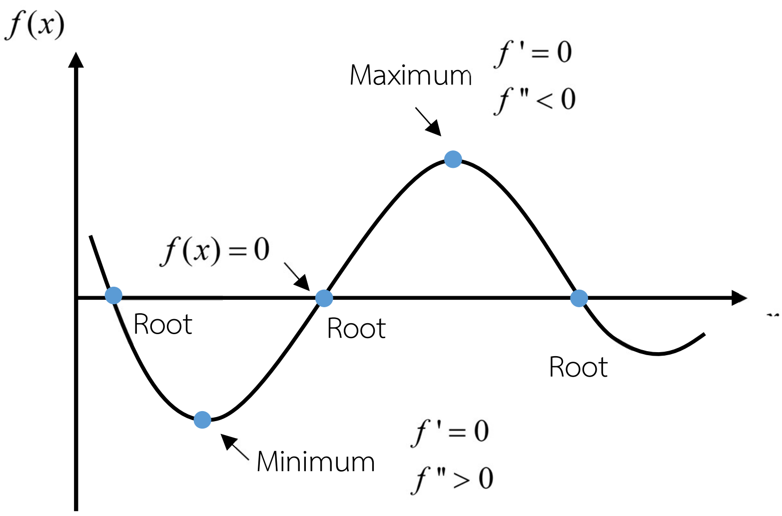
การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 3 การหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด

3.1 บทนำ

ในงานบางงานทางวิศวกรรมจำเป็นต้องหาค่าคงสุดหรือค่าต่ำสุด ซึ่งในบทนี้จะประยุกต์ความรู้ในบทที่ 2 มาใช้ สำหรับปัญหาทางวิศวกรรมเช่น การหาค่าก่อสร้างต่ำสุด เป็นต้น จากรูปที่ 3.1 พบว่า จุดสูงสุดของกราฟเป็นจุดที่มีค่าความชันเท่ากับ 0 ($f'(x)=0$) และอนุพันธ์อันดับสองมีค่าเป็น “-” ($f''(x)<0$) ในขณะที่จุดต่ำสุดของกราฟเป็นจุดที่มีค่าความชันเท่ากับ 0 ($f'(x)=0$) เช่นกันแต่อนุพันธ์อันดับสองมีค่าเป็น “+” ($f''(x)>0$)

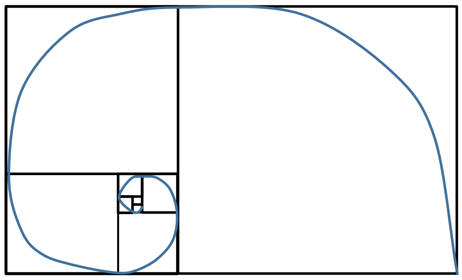


รูปที่ 3.1 ความแตกต่างระหว่างรากของสมการและค่าสูงสุดหรือต่ำสุด

ที่มา: Chapra (2010)

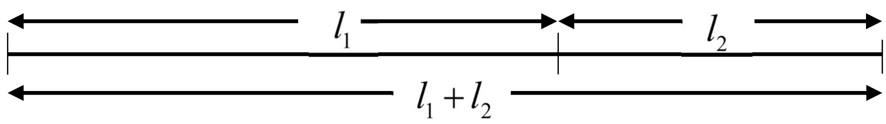
3.2 วิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ

วิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ (Golden-Section Search) เป็นวิธีการแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ สัดส่วนทองคำ (Golden Ratio) เป็นการคำนวนทางคณิตศาสตร์เพื่อทำให้งานออกแบบมีสัดส่วนที่งามตามสูตตรคำนวณที่คิดค้นโดย เลโอนาร์โด ฟีโบนัชชี อัตราส่วนของสัดส่วนทองคำจะเท่ากับ 1 : 1.618 ดังรูปที่ 3.2



รูปที่ 3.2 การประยุกต์ใช้สัดส่วนทองคำในการออกแบบ

จากนิยามสัดส่วนทองคำดังนั้นจะแบ่งช่วงออกเป็น 2 ส่วน ดังรูปที่ 3.3 ซึ่งค่า l_1 และ l_2 สามารถหาได้จากสมการ (3.1)



รูปที่ 3.3 การแบ่งช่วงการหาค่า l_1 และ l_2 ตามสัดส่วนทองคำ

ที่มา: Chapra (2010)

$$\frac{l_1 + l_2}{l_1} = \frac{l_1}{l_2} \tag{3.1}$$

$$\frac{l_1}{l_1} + \frac{l_2}{l_1} = \frac{l_1}{l_2}$$

กำหนดให้ $\frac{l_1}{l_2} = \phi$ ดังสมการ (3.1) ได้เป็นสมการ (3.2)

$$1 + \frac{1}{\phi} = \phi \text{ หรือ } \phi^2 - \phi - 1 = 0 \tag{3.2}$$

จากสมการ (3.2) ค่า ϕ ที่ได้มีค่าเท่ากับ 1.618 และ -0.618 ดังนั้นเลือกใช้ค่า ϕ ที่เป็นบวกซึ่งมีค่าเท่ากับ 1.618

วิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำสามารถใช้หลักการหาระเบียบวิธีแบ่งครึ่งช่วงมาประยุกต์ใช้และสามารถแบ่งออกได้ 2 กรณี

1. การหาค่าต่ำสุดวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ

ขั้นที่ 1. กำหนดค่าของ x_1 และ x_2 ดังนี้

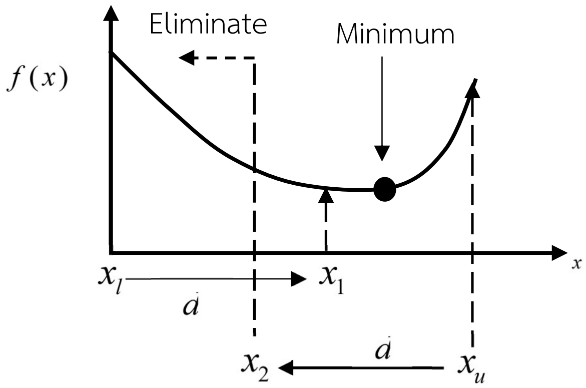
$$x_1 = x_l + d$$

$$x_2 = x_u - d$$

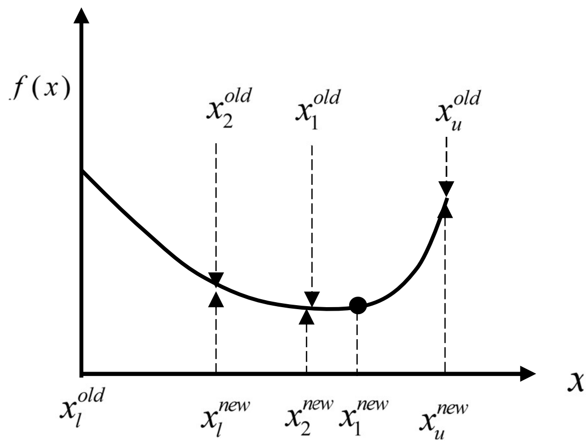
$d = (\phi - 1)(x_u - x_l) = 0.618(x_u - x_l)$

ขั้นที่ 2 ถ้า $f(x_1) < f(x_2)$ แสดงว่า $f(x_1)$ มีจุดต่ำสุดในช่วงระหว่าง x_1 ถึง x_u ดังนั้น $x_l^{new} = x_2$ และ $x_u^{new} = x_u^{old}$ แต่ถ้า $f(x_1) > f(x_2)$ แสดงว่า $f(x_2)$ มีจุดต่ำสุดในช่วงระหว่าง x_l ถึง x_1 ดังนั้น กำหนดให้ $x_u^{new} = x_1$ และ $x_l^{new} = x_l^{old}$ ซึ่งสามารถสรุปได้ดังรูปที่ 3.4

ขั้นที่ 3 ทำการคำนวณซ้ำ



(ก)



(ข)

รูปที่ 3.4 แผนภาพการกำหนดค่า x_1 และ x_2 ต่อการหาค่าต่ำสุด

ที่มา: Chapra (2010)

2. การหาค่าสูงสุดวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ

ขั้นที่ 1. กำหนดค่าของ x_1 และ x_2 ดังนี้

$x_1 = x_l + d$

$x_2 = x_u - d$

$d = (\phi - 1)(x_u - x_l) = 0.618(x_u - x_l)$

ขั้นที่ 2 ถ้า $f(x_1) < f(x_2)$ แสดงว่า $f(x_1)$ มีจุดสูงสุดในช่วงระหว่าง x_1 ถึง x_u ดังนั้น $x_u^{new} = x_1$ และ $x_l^{new} = x_l^{old}$ แต่ถ้า $f(x_1) > f(x_2)$ แสดงว่า $f(x_2)$ มีจุดสูงสุดในช่วงระหว่าง x_l ถึง x_1 ดังนั้นกำหนดให้ $x_l^{new} = x_2$ และ $x_u^{new} = x_u^{old}$ ซึ่งสามารถสรุปได้ดังรูปที่ 3.4

ขั้นที่ 3 ทำการคำนวณซ้ำ

ตัวอย่างที่ 3.1 จงคำนวณหาความเข้มข้นของสารอาหารที่เหมาะสมที่ทำให้อัตราการเจริญเติบโตของยีสต์สูงสุดด้วยวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ เมื่ออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ในสารอาหารที่ความเข้มข้นต่างๆ สามารถเขียนได้ดังนี้ $g = \dfrac{2c}{4 + 0.8c + c^2 + 0.2c^3}$ เมื่อ g คืออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ (day^{-1})และ c คือความเข้มข้นสารอาหาร (mg/L)

วิธีทำ

เนื่องจากเป็นการหาความเข้มข้นของสารอาหารที่เหมาะสมที่ทำให้อัตราการเจริญเติบโตของยีสต์สูงสุดดังนั้นเลือกกรณีที่ 2

กำหนดให้ความเข้มข้นของสารอาหารอยู่ในช่วงระหว่าง 1 ถึง 3 ดังนั้น $x_l = 1$ และ $x_u = 3$

รอบที่ 1

ขั้นที่ 1

$$d = (\phi - 1)(x_u - x_l) = 0.618(3-1) = 1.236$$

$$x_1 = 1 + 1.236 = 2.236$$

$$x_2 = 3 - 1.236 = 1.764$$

ขั้นที่ 2

$$f(x_1) = 0.3434$$

$$f(x_2) = 0.3667$$

ดังนั้น $f(x_1) < f(x_2)$ ซึ่งจะทำให้ $x_u^{new} = x_1 = 2.236$ ส่วน $x_l = 1$

รอบที่ 2

ขั้นที่ 1

$$d = (\phi - 1)(x_u - x_l) = 0.618(2.236 - 1) = 0.7638$$

$$x_1 = 1 + 0.7638 = 1.7638$$

$$x_2 = 2.236 - 0.7638 = 1.4722$$

ขั้นที่ 2

$$f(x_1) = 0.3667$$

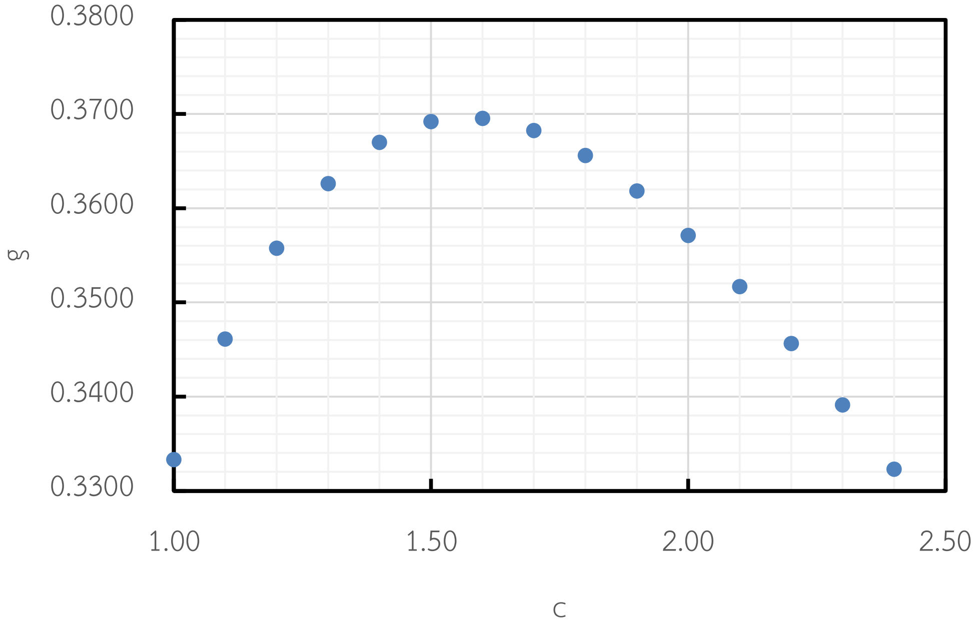
$$f(x_2) = 0.3688$$

ดังนั้น $f(x_1) < f(x_2)$ ซึ่งจะทำให้ $x_u^{new} = 1.7638$ ส่วน $x_l = 1$

ซึ่งผลการคำนวณสามารถสรุปได้ตามตารางที่ E3.1-1 ซึ่งจะได้ว่าความเข้มข้นของสารอาหารที่เหมาะสมอยู่ระหว่าง 1.5673 และ 1.5697 ดังแสดงในรูปที่ E3.1-1

ตารางที่ E3.1-1 ผลการคำนวณการหาค่าสูงสุดวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ

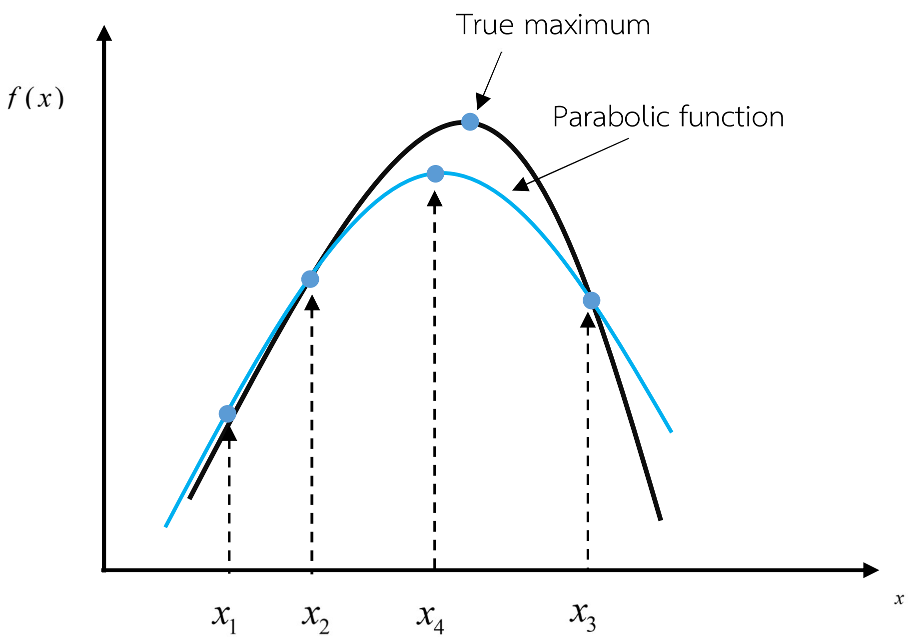
รอบ	x_l	x_u	d	x_1	x_2	$f(x_1)$	$f(x_2)$	x_l^{new}	x_u^{new}
1.0000	1.0000	3.0000	1.2360	2.2360	1.7640	0.3434	0.3667	1.0000	2.2360
2.0000	1.0000	2.2360	0.7638	1.7638	1.4722	0.3667	0.3688	1.0000	1.7638
3.0000	1.0000	1.7638	0.4721	1.4721	1.2918	0.3688	0.3622	1.2918	1.7638
4.0000	1.2918	1.7638	0.2917	1.5835	1.4721	0.3696	0.3688	1.4721	1.7638
5.0000	1.4721	1.7638	0.1803	1.6524	1.5836	0.3691	0.3696	1.4721	1.6524
6.0000	1.4721	1.6524	0.1114	1.5835	1.5410	0.3696	0.3696	1.5410	1.6524
7.0000	1.5410	1.6524	0.0689	1.6098	1.5835	0.3695	0.3696	1.5410	1.6098
8.0000	1.5410	1.6098	0.0426	1.5835	1.5673	0.3696	0.3696	1.5410	1.5835
9.0000	1.5410	1.5835	0.0263	1.5673	1.5572	0.3696	0.3696	1.5572	1.5835
10.0000	1.5572	1.5835	0.0163	1.5735	1.5673	0.3696	0.3696	1.5572	1.5735
11.0000	1.5572	1.5735	0.0100	1.5673	1.5635	0.3696	0.3696	1.5635	1.5735
12.0000	1.5635	1.5735	0.0062	1.5697	1.5673	0.3696	0.3696	1.5635	1.5697
13.0000	1.5635	1.5697	0.0038	1.5673	1.5658	0.3696	0.3696	1.5658	1.5697
14.0000	1.5658	1.5697	0.0024	1.5682	1.5673	0.3696	0.3696	1.5673	1.5697



รูปที่ E3.1-1 ความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของสารอาหารกับอัตราการเจริญเติบโตของยีสต์

3.3 วิธีการประมาณค่ากำลังสอง

วิธีการประมาณค่ากำลังสอง (Parabolic interpolation) เป็นวิธีที่อาศัยฟังก์ชันพหุนามกำลัง 2 มาประมาณหาค่าสูงสุด-ต่ำสุด ดังแสดงในรูปที่ 3.5 จากรูปที่ 3.5 จุด x_4 สามารถหาได้โดยอาศัยสมการ (3.3) ซึ่งต้องอาศัยจุด x_1 x_2 และ x_3 ในการทำนาย เมื่อได้จุด x_4 จำเป็นต้องนำข้อมูลมาเรียงตามค่าของ $f(x)$ โดยให้ค่าของ $f(x_4)$ อยู่ตรงกลาง เพื่อใช้ในการทำนายหาค่า x_4 ใหม่ต่อไป



รูปที่ 3.5 วิธีการประมาณค่ากำลังสองสำหรับการหาค่าสูงสุด

ที่มา: Chapra (2010)

$$x_4 = x_2 - \frac{1}{2}\frac{(x_2-x_1)^2[f(x_2)-f(x_3)]-(x_2-x_3)^2[f(x_2)-f(x_1)]}{(x_2-x_1)[f(x_2)-f(x_3)]-(x_2-x_3)[f(x_2)-f(x_1)]} \qquad (3.3)$$

ตัวอย่างที่ 3.2 จงคำนวณหาความเข้มข้นของสารอาหารที่เหมาะสมที่ทำให้อัตราการเจริญเติบโตของยีสต์สูงสุดด้วยวิธีประมาณค่ากำลังสอง เมื่ออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ในสารอาหารที่ความเข้มข้นต่างๆ สามารถเขียนได้ดังนี้ $g = \frac{2c}{4+0.8c+c^2+0.2c^3}$ เมื่อ g คืออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ (day^{-1}) และ c คือความเข้มข้นสารอาหาร (mg/L)

วิธีทำ

รอบที่ 1 ทำการเดาค่าของ x_1 x_2 และ x_3 โดยเดาให้มีค่าเท่ากับ 1 2 และ 3 ตามลำดับ

$f(x_1) = 0.3333$

$f(x_2) = 0.3571$

$f(x_2) = 0.2885$

ใช้สมการ (3.3) เพื่อหาค่า x_4

$x_4 = 1.7574$

ดังนั้นจัดเรียงค่าของ x_1 x_2 x_3 และ x_4 พบว่าได้เป็น $x_1 < x_4 < x_2 < x_3$ ดังนั้นในรอบถัดไปกำหนดให้ x_1 x_2 และ x_3 เป็น 1.000 1.7574 และ 2.0000

ตารางที่ E3.2-1 ผลการคำนวณการหาค่าสูงสุดวิธีประมาณค่ากำลังสอง

x_1	x_2	x_3	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	x_4	$f(x_4)$
1.0000	2.0000	3.0000	0.3333	0.3571	0.2885	1.7574	0.3669
1.0000	1.7574	2.0000	0.3333	0.3669	0.3571	1.7677	0.3666
1.0000	1.7574	1.7677	0.3333	0.3669	0.3666	1.7683	0.3666
1.7574	1.7677	1.7683	0.3669	0.3666	0.3666	1.7679	0.3666

ซึ่งวิธีนี้จะเห็นว่าเมื่อทำครบ 4 รอบ ค่าของ $x_4 = 1.7679$

3.4 วิธีนิวตัน

ในบทที่ 2 ได้ใช้ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันในการหารากของสมการ จากความรู้ที่ว่าจุดสูงสุด หรือจุดต่ำสุดเป็นจุดที่กราฟมีค่าความชันเท่ากับ 0 ดังนั้นระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันดังสมการมาประยุกต์ใช้ในการหาจุดสูงสุด-จุดต่ำสุดด้วยวิธีการนิวตัน (Newton’ Method) ดังสมการ (3.4)

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f'(x_i)}{f''(x_i)} \tag{3.4}$$

ตัวอย่างที่ 3.3 จงคำนวณหาความเข้มข้นของสารอาหารที่เหมาะสมที่ทำให้อัตราการเจริญเติบโตของยีสต์สูงสุดด้วยวิธีนิวตัน เมื่ออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ในสารอาหารที่ความเข้มข้นต่างๆ สามารถเขียนได้ดังนี้ $g = \dfrac{2c}{4+0.8c+c^2+0.2c^3}$ เมื่อ g คืออัตราการเจริญเติบโตของยีสต์ (day^{-1})และ c คือความเข้มข้นสารอาหาร (mg/L)

วิธีทำ

จากสมการ (3.4) จำเป็นต้องหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งและอันดับสองของสมการ (E3.3-1)

$$g = \frac{2c}{4+0.8c+c^2+0.2c^3} \tag{E3.3-1}$$

$$g' = \frac{2(4+0.8c+c^2+0.2c^3) - 2c(0.8+2c+0.6c^2)}{(4+0.8c+c^2+0.2c^3)^2} = \frac{8-2c^2-c^3}{(4+0.8c+c^2+0.2c^3)^2}$$

$$g'' = \frac{(4+0.8c+c^2+0.2c^3)^2(-4c-3c^2) - \left(8-2c^2-c^3\right)2(4+0.8c+c^2+0.2c^3)(0.8+2c+0.6c^2)}{(4+0.8c+c^2+0.2c^3)^4}$$

3.5 แบบฝึกหัด

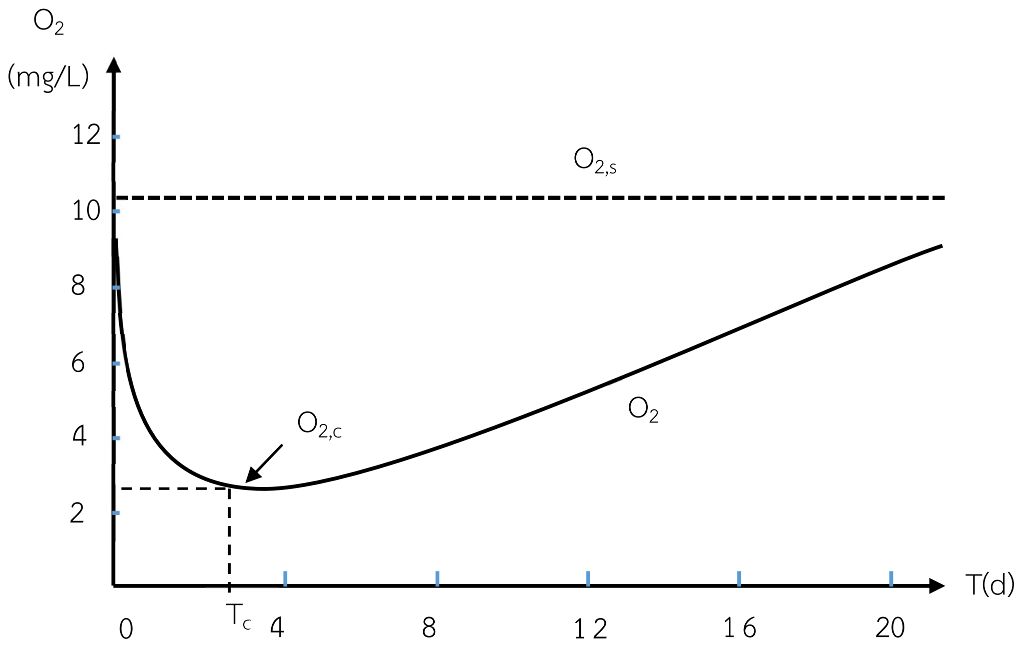
HM3.1 ปฏิกิริยา A $\longrightarrow$ C มีสมการราคาการผลิตสาร C ได้ดังสมการ $Cost = a\left(\frac{1}{(1-x_A)^2} + \frac{6}{x_A}\right)$ เมื่อ Cost คือราคาในการผลิตสาร C ($) a คือค่าคงที่ซึ่งมีค่าเท่ากับ 1000 $/kg x_A คือค่าคอนเวอร์ชันของสาร A จงหาคอนเวอร์ชันของสาร A ที่ทำให้ได้ราคาการผลิตสาร C ต่ำสุดด้วยวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ วิธีการประมาณค่ากำลังสอง และวิธีนิวตัน

HM3.2 แบบจำลองของ Streeter-Phelps เป็นแบบจำลองใช้อธิบายการเปลี่ยนของปริมาณออกซิเจนในแหล่งน้ำเมื่อมีการปล่อยน้ำเสียลงสู่แหล่งน้ำ แบบจำลองของ Streeter-Phelps ได้อธิบายการเปลี่ยนแปลงของออกซิเจนในน้ำเกิดจาก 1. ความต้องการออกซิเจนของจุลินทรีย์ในน้ำสำหรับการย่อยสลายสารอินทรีย์ (BOD) 2. ปริมาณออกซิเจนในน้ำที่จุดปล่อยน้ำเสีย 3. การเติมออกซิเจนลงในแหล่งน้ำ เช่น การสังเคราะห์แสงของพืช การเติมอากาศ การละลายของออกซิเจน เป็นต้น แบบจำลองของ Streeter-Phelps จึงถูกประยุกต์ใช้ในการหาระดับออกซิเจนละลายตามความยาวของลำน้ำ ดังรูปที่ HM3.2-1 จากรูปที่ HM3.2-1 พบว่าจุดต่ำสุดของออกซิเจนในแหล่งน้ำคือจุด t_c คือเวลาที่น้ำไหลจากแหล่งปล่อยน้ำเสีย ซึ่งถ้าจุดต่ำสุดของออกซิเจนต่ำกว่า 2 mg/L จะทำให้เหมาะต่อการดำรงชีวิตของสัตว์น้ำ สำหรับแบบของ Streeter-Phelps ดังสมการ (HM3.2-1)

$$o_2 = o_{2,s} - \frac{k_d L_o}{k_d + k_s - k_a}\left(e^{-k_a t} - e^{-(k_d + k_s)t}\right) - \frac{s_b}{k_a}\left(1 - e^{-k_a t}\right) \qquad \text{(HM3.2-1)}$$

เมื่อ O_2 คือความเข้มข้นของออกซิเจนที่เวลาในการไหลของน้ำต่างๆ (mg/L) $O_{2,S}$ คือความเข้มข้นอิ่มตัวของออกซิเจนที่ละลายในน้ำ (mg/L) t คือเวลาในการไหลของน้ำจากจุดปล่อย (day) L_0 คือความเข้มข้นของค่า BOD ที่จุดปล่อยน้ำ (mg/L) k_d คือค่าคงที่อัตราการย่อยสลาย BOD (day^{-1}) k_s คือค่าคงที่ในการตกตะกอนของ BOD (day^{-1}) k_a คือค่าคงที่การละลายของออกซิเจนจากอากาศ (day^{-1}) และ S_b คือค่าความต้องการของออกซิเจนของตะกอน (mg/L-day)

จงหาเวลาในการไหลของน้ำจากจุดปล่อยที่ทำให้ความเข้มข้นของออกซิเจนต่ำสุด เมื่อความเข้มข้นอิ่มตัวของออกซิเจนที่ละลายในน้ำ 10 mg/L ความเข้มข้นของค่า BOD ที่จุดปล่อยน้ำ 50 mg/L ค่าคงที่อัตราการย่อยสลาย BOD 0.1 day^{-1} ค่าคงที่ในการตกตะกอนของ BOD 0.05 day^{-1} ค่าคงที่การละลายของออกซิเจนจากอากาศ 0.6 day^{-1} และค่าความต้องการของออกซิเจนของตะกอน 1 mg/L-day ด้วยวิธีแบ่งช่วงตามสัดส่วนทองคำ วิธีการประมาณค่ากำลังสอง และวิธีนิวตัน



รูปที่ HM3.2-1 ความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจนในแหล่งน้ำ
ที่มา: Chapra (2010)

HM3.3 ท่อน้ำร้อนถูกหุ้มฉนวนเพื่อป้องกันการถ่ายเทความร้อนจากไอน้ำภายในท่อสู่อากาศ สำหรับอุณหภูมิที่ผิวท่อไอน้ำมีค่าดังสมการ HM3.3-1

$$T = T_{air} + \frac{q}{2\pi}\left(\frac{1}{k}\ln\left(\frac{r_w + r_i}{r_w}\right) + \frac{1}{h}\left(\frac{1}{r_w + r_i}\right)\right) \qquad \text{(HM3.3-1)}$$

เมื่อ อัตราการถ่ายเทความร้อน (q) เท่ากับ 75 W/m รัศมีภายนอกท่อไอน้ำ (r_w) เท่ากับ 6 cm ค่าการนำความร้อนของฉนวน (k) เท่ากับ 0.17 W/m-K สัมประสิทธิ์การพาความร้อน (h) เท่ากับ 12 W/m^2-K และอุณหภูมิอากาศ (T_{air}) เท่ากับ 293 K และ r_i คือความหนาของฉนวน (cm) จงหาความหนาของฉนวนที่มีค่าต่ำสุด

3.6 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. Ward Cheney and David Kincaid, Numerical Mathematics and Computing (Sixth edition), Thomson Higher Education, 2008

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 5

หัวข้อการสอน

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต หัวข้อ 4.1 – 4.6

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่เป็นระบบสมการพีชคณิต
2. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับเมตริกซ์
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการแปลงระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปเมตริกซ์
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ

5 เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการหาผลเฉลยด้วยวิธีกฎของคราเมอร์

6. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

เนื้อหา

1 บทนำ

2 ความรู้เบื้องต้นของเมตริกซ์

3 การแปลงระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปเมตริกซ์

4 การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ

5 การหาผลเฉลยด้วยวิธีกฎของคราเมอร์

6 ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 6

หัวข้อการสอน

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต หัวข้อ 4.7 – 4.10

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการหาคำตอบสำหรับเมตริกซ์แถบ
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยการแก้ปัญหาโดยการทำซ้ำ
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาระบบสมการพีชคณิตด้วยระบบสมการไม่เชิงเส้น

เนื้อหา

1. การหาคำตอบสำหรับเมตริกซ์แถบ
2. การแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU
3. การแก้ปัญหาโดยการทำซ้ำ
4. ระบบสมการไม่เชิงเส้น

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 4 การแก้ระบบสมการพีชคณิต

4.1 บทนำ

ปัญหาหลายอย่างในงานวิศวกรรมเคมี โดยเฉพาะการทำสมดุลมวล จำเป็นต้องแก้สมการเพื่อหาค่าของตัวแปรต่างๆ เช่น การทำสมดุลมวลของการเจือจางสารในถังผสมต่าง ๆ ดังรูปที่ 4.1 จากรูปที่ 4.1 เมื่อ x คือ ความเข้มข้นของสารภายในถัง (kg/L) Q คืออัตราการไหลเชิงปริมาตรของสารที่ออกจากถัง (L/min) และ F คืออัตราการไหลเชิงมวล (kg/min) และสามารถเขียนสมการสมดุลมวลได้ดังนี้

อัตราการเปลี่ยนแปลงมวลต่อเวลา = อัตราการไหลมวลเข้าถัง – อัตราการไหลมวลออกจากถัง

เนื่องจากดำเนินการที่สภาวะคงตัว หรือ อัตราการเปลี่ยนแปลงมวลต่อเวลามีค่าเท่ากับ 0 ดังนั้น

อัตราการไหลมวลเข้าถัง = อัตราการไหลมวลออกจากถัง

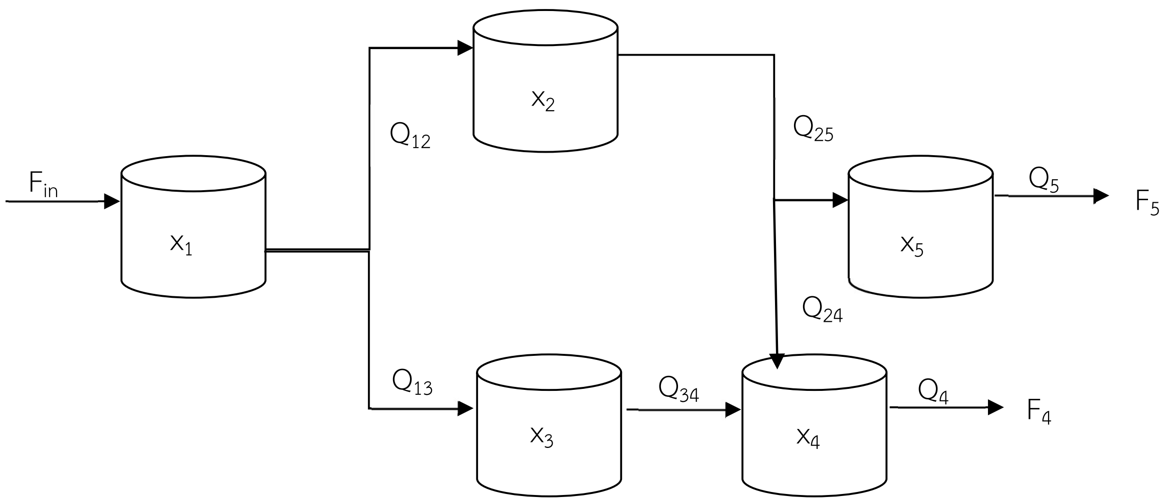
ถังที่ 1 $F_{in} = x_1\left(Q_{12} + Q_{13}\right)$

ถังที่ 2 $x_1Q_{12} = x_2\left(Q_{24} + Q_{25}\right)$

ถังที่ 3 $x_1Q_{13} = x_3Q_{34}$

ถังที่ 4 $x_2Q_{24} + x_3Q_{34} = x_4Q_4$

ถังที่ 5 $x_2Q_{25} = x_5Q_5$



รูปที่ 4.1 การทำสมดุลมวลของการเจือจางสารในถังผสมต่าง ๆ

4.2 ความรู้เบื้องต้นของเมตริกซ์

4.2.1 ความหมายของเมตริกซ์

เมตริกซ์ (Matrix) หมายถึง การนำชุดตัวเลขมาเรียงกันอย่างเป็นระบบ ภายใต้เครื่องหมายก้ามปู “[]” หรือเครื่องหมายวงเล็บ “()” ตัวเลขภายในเครื่องหมาย “[]” หรือ “()” จะเรียกว่าสมาชิกของเมตริกซ์ สำหรับเมตริกซ์ที่มีมิติ mxn คือ เมตริกซ์ที่มีจำนวนแถวเท่ากับ m และจำนวนหลักเท่ากับ n ตัวอย่างเช่น เมตริกซ์ $3x3$ คือเมตริกซ์ที่มีจำนวนแถวเท่ากับ 3 และจำนวนหลักเท่ากับ 3 ซึ่งในเมตริกซ์นี้จะมีจำนวนสมาชิกเท่ากับ $3x3 = 9$ ตัว โดยมีสัญญาลักษณ์ดังนี้

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

โดย a_{ij} หมายถึง สมาชิกที่อยู่ในแถว i หลักที่ j

การเรียงตัวของกลุ่มตัวเลข หรือสมาชิก ภายในเมตริกซ์ทำให้สามารถจำแนกชนิดของเมตริกซ์และมีชื่อเรียกเฉพาะดังนี้

1. เมตริกซ์แถว (Row Matrix) เป็นเมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ $1xn$ เช่น เมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ $1x3$

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \end{bmatrix}$$

2. เมตริกซ์หลัก (Column Matrix) เป็นเมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ $mx1$ เช่น เมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ $3x1$

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{bmatrix}$$

3. เมตริกซ์ศูนย์ (Zero Matrix) เป็นเมตริกซ์ที่มีสมาชิกทุกตัวมีค่าเท่ากับ 0 เช่น เมตริกซ์ศูนย์ที่มีมิติเท่ากับ $3x3$

$$[A] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

4. เมตริกซ์จัตุรัส (Square Matrix) เป็นเมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ mxm เช่น เมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ $3x3$

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ -1 & 3 & 5 \\ 4 & 9 & 7 \end{bmatrix}$$

5. เมตริกซ์ทแยงมุม (Diagonal Matrix) คือเมทริกซ์จัตุรัสที่มีสมาชิกทุกตัวที่ไม่ได้อยู่บนเส้นทแยงมุมหลัก (Main Diagonal) มีค่าเป็นศูนย์ทั้งหมด

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

6. สเกลาร์เมตริกซ์ (Scalar Matrix) เป็นเมตริกซ์จัตุรัส ที่มีสมาชิกในแนวเส้นทแยงมุมหลัก เท่ากันหมด และสมาชิกที่เหลือเป็น 0 หมด เช่น

$$[A]=\begin{bmatrix}2 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}$$

7. เมตริกซ์เอกลักษณ์ (Identity Matrix) เป็นเมตริกซ์จัตุรัส ที่มีสมาชิกในแนวเส้นทแยงมุมหลัก (Main Diagonal) เท่ากับ 1 และสมาชิกที่เหลือเป็น 0 หมด และใช้สัญญาลักษณ์ของเมตริกซ์เป็น $[I]$ เช่น

$$[I]=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

8. เมตริกซ์สามเหลี่ยมบน (Upper Triangular Matrix) เป็นเมตริกซ์จัตุรัสที่มีสมาชิกทุกตัวที่อยู่ใต้เส้นทแยงมุมหลักเป็นศูนย์หมด เช่น

$$[A]=\begin{bmatrix}4 & 3 & 7\\ 0 & 2 & 5\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

9. เมตริกซ์สามเหลี่ยมล่าง (Lower Triangular Matrix) เป็นเมตริกซ์จัตุรัสที่มีสมาชิกทุกตัวที่อยู่เหนือเส้นทแยงมุมหลักเป็นศูนย์หมด เช่น

$$[A]=\begin{bmatrix}4 & 0 & 0\\ 3 & 2 & 0\\ 7 & 5 & 1\end{bmatrix}$$

10. เมตริกซ์แถบ (Banded Matrix) เป็นเมตริกซ์จัตุรัสที่มีสมาชิกทุกตัวเป็นศูนย์ ยกเว้นสมาชิกที่อยู่บนเส้นทแยงมุมหลักและสมาชิกที่ติดเส้นทแยงมุมหลัก เช่น

$$[A]=\begin{bmatrix}1 & 3 & 0 & 0\\ 6 & 2 & 9 & 0\\ 0 & 5 & 4 & 8\\ 0 & 0 & 6 & 5\end{bmatrix}$$

11. ทรานสโพสของเมตริกซ์ (Transpose Matrix) เป็นการสลับสมาชิกภายในแถวเป็นหลัก และหลักเป็นแถวภายในเมตริกซ์ และใช้สัญญาลักษณ์ของเมตริกซ์เป็น $[A]^T$ ดังนั้นมิติของเมตริกซ์ของ $[A]$ เท่ากับ mxn ในขณะที่มิติของเมตริกซ์ของ $[A]^T$ เท่ากับ nxm เช่น

$$[A]=\begin{bmatrix}1 & 2 & 6\\ 2 & 3 & 7\end{bmatrix} \text{ ในขณะที่ } [A]^T=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\\ 6 & 7\end{bmatrix}$$

4.2.2 สมบัติพีชคณิตของเมตริกซ์

สมบัติของการบวก

ถ้า $[A]$ $[B]$ และ $[C]$ เป็นเมตริกซ์ที่มีมิติเท่ากับ mxn สามารถดำเนินการได้ดังนี้

$[A]+[B]=[B]+[A]$ คุณสมบัติสลับที่

$([A]+[B])+[C]=[A]([B]+[C])$ คุณสมบัติเปลี่ยนกลุ่ม

$[A]+[0]=[A]$

$[A]-[A]=[0]$

$k[A]=[ka_{ij}]$

$k([A]+[B])=k[A]+k[B]$

การคูณเมตริกซ์ด้วยเมตริกซ์

เมตริกซ์จะคูณกันได้ก็ต่อเมื่อจำนวนหลักของเมตริกซ์ตัวตั้งเท่ากับจำนวนแถวของเมตริกซ์ตัวคูณ เช่น

$[A]_{ixk}\bullet[B]_{kxj}=[C]_{mxk}$ โดย $c_{ik}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}$

ตัวอย่างเช่น

$[A]=\begin{bmatrix}1 & 2 & 6\\ 2 & 3 & 7\end{bmatrix}$ $[B]=\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\\ 6 & 7\end{bmatrix}$ จงหาผลคูณของ $[A]\bullet[B]$

$$[A]\bullet[B]=\begin{bmatrix}1 & 2 & 6\\ 2 & 3 & 7\end{bmatrix}\bullet\begin{bmatrix}1 & 2\\ 2 & 3\\ 6 & 7\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1x1+2x2+6x6 & 1x2+2x3+6x7\\ 2x1+3x6+7x6 & 2x2+3x3+7x7\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}41 & 50\\ 50 & 62\end{bmatrix}$$

อินเวอร์ของเมตริกซ์

อินเวอร์ของเมตริกซ์ (Inverse Matrix) ใช้สัญญาลักษณ์เป็น $[A]^{-1}$ ซึ่งมีสมบัติดังนี้

$[A]\bullet[A]^{-1}=[A]^{-1}\bullet[A]=[I]$

ตัวอย่างสำหรับ อินเวอร์ของเมตริกซ์ที่มีมิติ $2x2$ เช่น

$[A]=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{bmatrix}$ ซึ่ง $[A]^{-1}$ หาได้ดังนี้

$$[A]^{-1}=\frac{1}{a_{11}a_{22}-a_{12}a_{21}}\begin{bmatrix}a_{22} & -a_{12}\\ -a_{21} & a_{11}\end{bmatrix}$$

4.3 การแปลงระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปเมตริกซ์

ตัวอย่างเช่นระบบสมการเชิงเส้นดังต่อไปนี้

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2$$
$$a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3$$

สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของ $[A]\bullet[x]=[b]$

เมื่อ $[A]$ คือเมตริกซ์ของสัมประสิทธิ์ $[x]$ คือเมตริกซ์ของตัวแปร และ $[b]$ คือเมตริกซ์ของคำตอบ

$$[A]=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad [x]=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \text{ และ } [b]=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

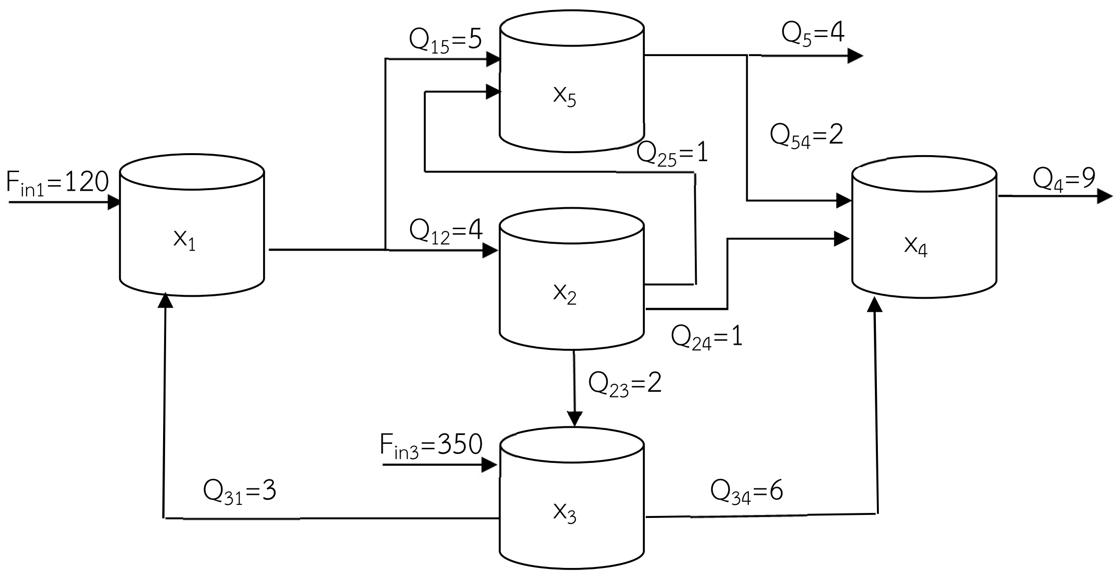
จากสมบัติอินเวอร์ของเมตริกซ์

$$[A]^{-1}[A][x]=[A]^{-1}[b]$$

$$[x]=[A]^{-1}[b]$$

ตัวอย่างที่ 4.1 จงทำสมดุลมวลของเกลือที่สภาวะคงตัวจากรูปที่ E4.1-1 เมื่อ Q คืออัตราการไหลเชิงปริมาตรของสารละลายน้ำเกลือ (L/min) และ x คือความเข้มข้นของน้ำเกลือ (g/L) F_{in} คืออัตราการไหลเชิงมวลของเกลือ (g/min) และตัวเลขแสดงทิศทางการไหลของสาร เช่น 12 หมายถึงสารละลายเกลือไหลจากถังที่ 1 ไปยังถังที่สอง สมดุลมวลที่สภาวะคงตัวสามารถเขียนสมการได้เป็น อัตราการไหลของมวลขาเข้า = อัตราการไหลออกของมวลขาออก เมื่อความเข้มข้นของสารขาออกจากถังมีค่าเท่ากับความเข้มข้นภายในถัง

ตัวอย่างถังที่ 1 $F_{in1} + Q_{31}x_3 = Q_{15}x_1 + Q_{12}x_1$



รูปที่ E4.1-1 ภาพประกอบตัวอย่างที่ 4.1

วิธีทำ

ถังที่ 1 $F_{in1} + Q_{31}x_3 = Q_{15}x_1 + Q_{12}x_1$ หรือ $120 + 3x_3 = 5x_1 + 4x_1$ หรือ $9x_1 - 3x_3 = 120$

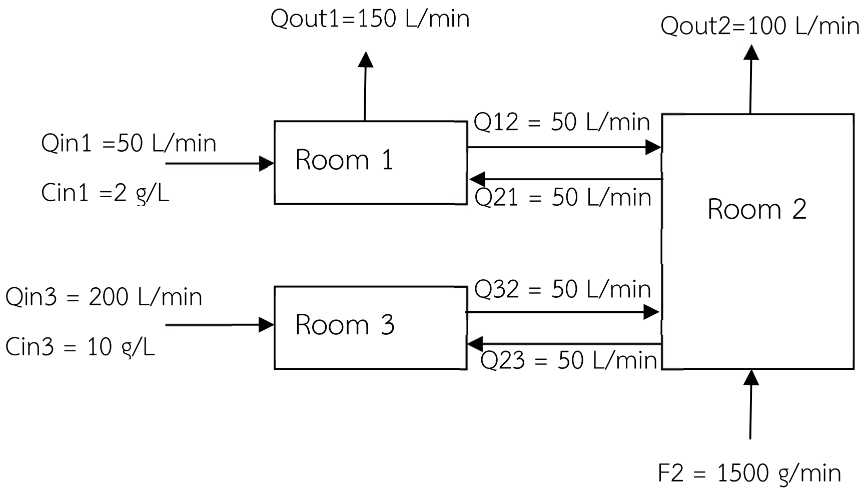
ถังที่ 2 $Q_{12}x_1 = Q_{25}x_2 + Q_{24}x_2 + Q_{23}x_2$ หรือ $4x_1 = 1x_2 + 1x_2 + 2x_2$ หรือ $4x_1 - 4x_2 = 0$

ถังที่ 3 $F_{in3}+Q_{23}x_2=Q_{31}x_3+Q_{34}x_3$ หรือ $350+2x_2=3x_3+6x_3$ หรือ $2x_2-9x_3=350$

ถังที่ 4 $Q_{24}x_2+Q_{54}x_5+Q_{34}x_3=Q_4x_4$ หรือ $1x_2+2x_5+6x_3=9x_4$ หรือ $x_2+6x_3-9x_4+2x_5=0$

ถังที่ 5 $Q_{15}x_1+Q_{25}x_2=Q_5x_5+Q_{54}x_5$ หรือ $5x_1+1x_2=4x_5+2x_5$ หรือ $5x_1+1x_2-6x_5=0$

ตัวอย่างที่ 4.2 จงเขียนสมดุลมวลของความเข้มข้นของกลิ่นกาสะลองในแต่ละห้อง ซึ่งแสดงการไหลของกลิ่นกาสะลองดังรูปที่ E4.2-1 เมื่อ Q คืออัตราการไหลเชิงปริมาตรของอากาศ (L/min) และ C คือความเข้มข้นของกลิ่นกาสะลอง (g/L) เมื่อ หมายเลข เช่น 12 แทนทิศทางการไหลของสารจากห้องที่ 1 ไปห้องที่ 2



รูปที่ E4.2-1 แผนภาพอัตรการไหลของกลิ่นดอกกาสะลองในแต่ละห้อง

วิธีทำ

จากสมการ

อัตราการไหลของมวลขาเข้า = อัตราการไหลออกของมวลขาออก

ดังนั้น

ห้องที่ 1 $Q_{in1}C_{in1}+Q_2C_2=Q_2C_1+Q_1C_1$

$$50x2+50C_2=50C_1+150C_1$$

$$200C_1-50C_2=100$$

ห้องที่ 2 $Q_2C_1+Q_3C_3+F_2=Q_2C_2+Q_3C_2+Q_2{}'C_2$

$$50C_1+50C_3+1500=50C_2+50C_2+100C_2$$

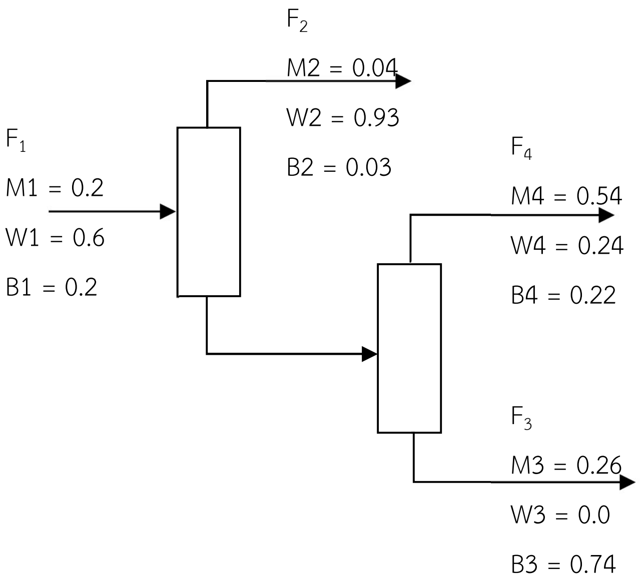
$$-50C_1+200C_2-50C_3=1500$$

ห้องที่ 3 $Q_{in3}C_{in3}+Q_3C_2=Q_3C_3$

$$200x10+50C_2=50C_3$$

$$-50C_2+50C_3=2000$$

ตัวอย่างที่ 4.3 ในการกลั่นสารผสมระหว่าง Methanol (M), water (W) และ Benzene (B) ด้วยหอกลั่นจำนวน 2 หอ พบว่าสัดส่วนโมลของส่วนผสมในแต่ละหอกลั่นแสดงได้ดังรูปที่ E4.3-1 เมื่ออัตราการป้อนสารเข้าหอที่ 1 ทั้งหมด (F_1) มีค่าเท่ากับ 10 mol/min จงเขียนสมดุลโมลเพื่อหาอัตราการไหลเชิงโมลของสาย F_2 F_3 และ F_4



รูปที่ E4.3-1 แผนภาพแสดงอัตรการไหลของสารที่เข้าหอกลั่นที่ 1 และ ที่2

วิธีทำ

เนื่องจากมีหอกลั่นจำนวน 2 หอ ดังนั้นสามารถทำสมดุลโมลทั้งระบบและทำสมดุลโมลทั้งแต่ละหอสำหรับสารแต่ละชนิดได้ดังนี้

อัตราการไหลเชิงโมลของสารขาเข้า = อัตราการไหลเชิงโมลของสารขาออก

1. สมดุลโมลทั้งระบบ

$F_1 = F_2 + F_3 + F_4$

$10 = F_2 + F_3 + F_4$ หรือ $F_2 + F_3 + F_4 = 10$

สมดุลโมลทั้งระบบของ Methanol

$M_1F_1 = M_2F_2 + M_3F_3 + M_4F_4$

$0.2x10 = 0.04F_2 + 0.26F_3 + 0.54F_4$ หรือ $0.04F_2 + 0.26F_3 + 0.54F_4 = 2$

สมดุลโมลทั้งระบบของ Water

$W_1F_1 = W_2F_2 + W_3F_3 + W_4F_4$

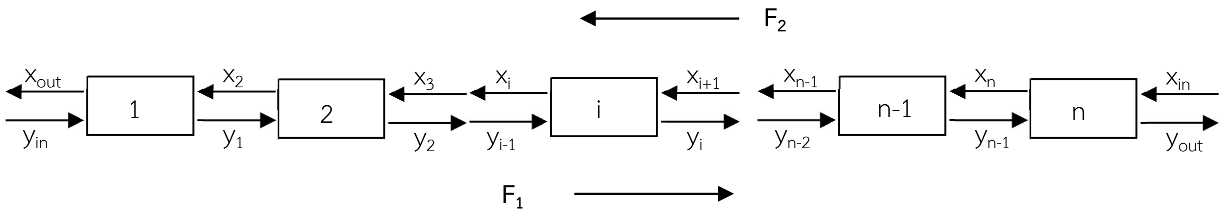
$0.6x10 = 0.93F_2 + 0F_3 + 0.24F_4$ หรือ $0.93F_2 + 0F_3 + 0.24F_4 = 6$

สมดุลโมลทั้งระบบของ Benzene

$B_1F_1 = B_2F_2 + B_3F_3 + B_4F_4$

$0.2x10 = 0.03F_2 + 0.74F_3 + 0.22F_4$ หรือ $0.03F_2 + 0.74F_3 + 0.22F_4 = 2$

ตัวอย่างที่ 4.4 กระบวนการสกัดสารโดยอาศัยตัวทำละลายชนิดของเหลว-ของเหลว เมื่อตัวทำละลายเป็นสารอินทรีย์เพื่อสกัดสารอินทรีย์ที่สามารถละลายในน้ำ โดยทำการสกัดแบบหลายขั้นตอน ดังแสดงในรูปที่ E4.4-1 เมื่อสารอินทรีย์ที่ละลายอยู่ในสารละลายน้ำมีสัดส่วนโดยมวลเริ่มต้นเป็น y_{in} และอัตราการไหลเชิงมวลเป็น F_1 kg/min โดยไหลเข้าถังสกัดที่ 1 ในขณะสารอินทรีย์ที่ละลายอยู่ในสารละลายอินทรีย์มีสัดส่วนโดยมวลเริ่มต้นเป็น x_{in} และอัตราการไหลเชิงมวลเป็น F_2 kg/min โดยไหลเข้าถังสกัดที่ n เมื่อทิศทางการไหลของสารละลายน้ำไหลสวนทางกับทิศทางการไหลของสารละลายอินทรีย์ สมมุติมีถังสกัดจำนวน n ถัง และ K เป็นค่าคงที่ในการสกัด ซึ่งมีค่าเท่ากับ $K = \dfrac{x_i}{y_i}$ จงเขียนสมดุลมวลของสารในแต่ละถัง



รูปที่ E4.4-1 แผนภาพแสดงทิศทางการไหลของสารที่เข้าถังสกัด

วิธีทำ

จากรูปที่ 4.5 เมื่อพิจารณาถังสกัดที่ i สามารถเขียนสมดุลมวลได้ดังนี้

$F_1 y_{i-1} + F_2 x_{i+1} = F_1 y_i + F_2 x_i$ และค่าคงที่ในการสกัด $K = \dfrac{x_i}{y_i}$ ดังนั้นสมการได้เป็น

$$F_1 y_{i-1} - F_1 y_i = F_2 x_i - F_2 x_{i+1} \qquad \text{(E4.4-1)}$$

เปลี่ยนสมการ (E4.4-1) ให้อยู่เฉพาะเทอมของ y โดยแทนค่า $x_i = Ky_i$

$$F_1 y_{i-1} - F_1 y_i - F_2 x_i + F_2 x_{i+1} = 0$$

$$F_1 y_{i-1} - F_1 y_i - F_2 K y_i + F_2 K y_{i+1} = 0$$

$$F_1 y_{i-1} - (F_1 + F_2 K) y_i + F_2 K y_{i+1} = 0$$

$$y_{i-1} - \left(1 + \frac{F_2}{F_1}K\right) y_i + \left(\frac{F_2}{F_1}K\right) y_{i+1} = 0 \qquad \text{(E4.4-2)}$$

ในทางกลับกัน เปลี่ยนสมการ (E4.4-1) ให้อยู่เฉพาะเทอมของ x โดยแทนค่า $y_i = \dfrac{x_i}{K}$

$$\frac{F_1}{F_2} y_{i-1} + x_{i+1} = \frac{F_1}{F_2} y_i + x_i$$

$$\frac{F_1}{F_2 K} x_{i-1} + x_{i+1} = \frac{F_1}{F_2}\frac{x_i}{K} + x_i = \left(\frac{F_1}{F_2 K} + 1\right) x_i$$

$$\frac{F_1}{F_2K}x_{i-1}-\left(\frac{F_1}{F_2K}+1\right)x_i+x_{i+1}=0 \qquad \text{(E4.4-3)}$$

4.4 การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ

การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟเป็นการแก้ระบบสมการสำหรับสมการที่มีตัวแปรไม่เกิน 3 ตัวแปร ตัวอย่างเช่น ในระบบสมการเชิงเส้นสองตัวแปร เช่น

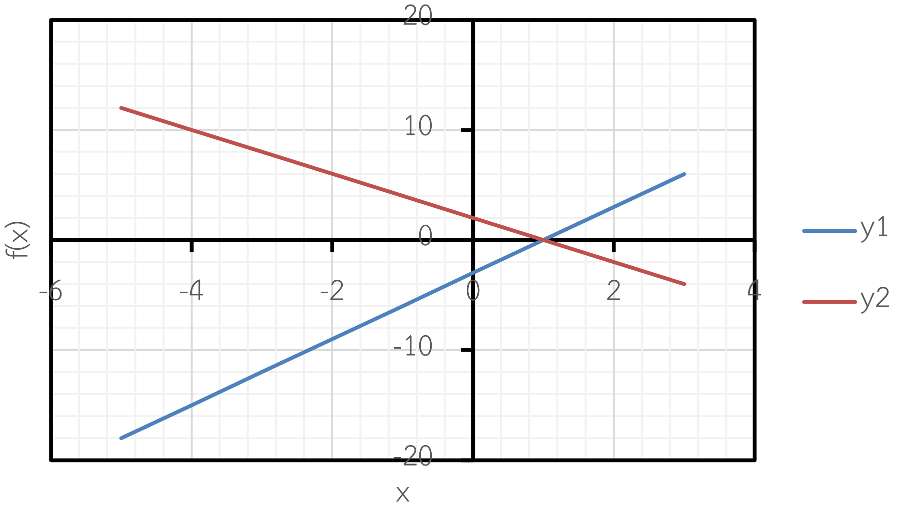
$ax+by=c$

$dx+ey=f$

โดยจุดตัดระหว่างสมการทั้งสองเป็นคำตอบของสมการ เช่น

$\begin{matrix}3x-y=3\\2x+y=2\end{matrix}$ ซึ่ง $\begin{matrix}y_1=3x-3\\y_2=2-2x\end{matrix}$ นำไปเขียนกราฟได้ดังรูปที่ 4.6

จากรูปที่ 4.2 จะเห็นว่าคำตอบของสมการคือ $x=1$ และ $y=0$



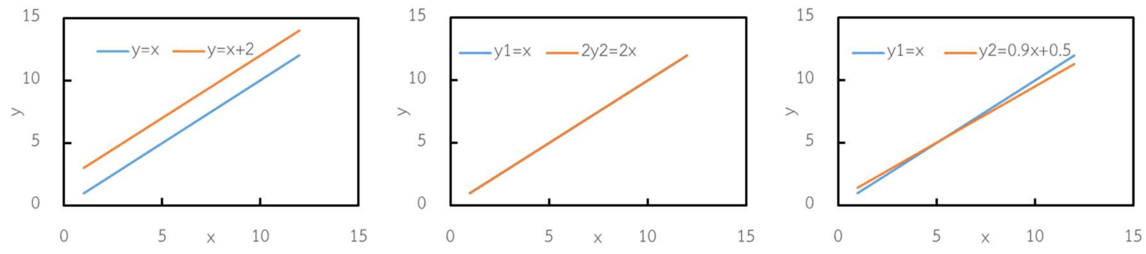
รูปที่ 4.2 ภาพประกอบการแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ

การแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟไม่สามารถหาคำตอบของระบบสมการเชิงเส้นได้เกิดขึ้นได้ 3 กรณีดังนี้

กรณีที่ 1 เมื่อความชันของเส้นตรงทั้งสองเส้นมีค่าเท่ากัน และขนานกัน ดังนั้นเส้นตรงสองเส้นนี้จะไม่มีสามารถตัดกันได้ ทำให้ไม่สามารถหาผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้น เนื่องจากไม่มีจุดตัด ดังรูปที่ 4.3 (ก)

กรณีที่ 2 เมื่อความชันของเส้นตรงทั้งสองเส้นมีค่าเท่ากันและซ้อนทับกัน ดังนั้นเส้นตรงสองเส้นนี้จะมีผลเฉลยเป็นจำนวนอนันต์ ดังรูปที่ 4.3 (ข)

กรณีที่ 3 เมื่อความชันของเส้นตรงทั้งสองเส้นมีค่าใกล้เคียงกัน ดังนั้นเส้นตรงสองเส้นนี้จะมีจุดตัดกันแต่ไม่สามารถระบุจุดตัดได้อย่างชัดเจนด้วยวิธีการเขียนกราฟ ดังรูปที่ 4.3 (ค)



(ก) (ข) (ค)

รูปที่ 4.3 สภาวะที่ไม่เหสาะสมกับการแก้ระบบสมการเชิงเส้นด้วยวิธีการเขียนกราฟ

4.5 การหาผลเฉลยด้วยวิธีกฎของคราเมอร์

วิธีกฎของคราเมอร์ (Cramer’s rule) เป็นวิธีแก้ปัญหาระบบสมการโดยการหาค่าดีเทอร์มิแนนท์ (Determinant) ซึ่งมีสูตรตาม

$$x_i = \frac{\det[A]_i}{\det[A]} \tag{1-17}$$

การหาค่าดีเทอร์มิแนนท์สามารถหาได้โดยใช้ฟังก์ชันคำสั่งใน excel คือ MDETERM(array) และกดเครื่องหมาย shift และ enter พร้อมกัน

ตัวอย่างที่ 4.5 จากสมดุลมวลของเกลือที่สภาวะคงตัวจากตัวอย่างที่ 4.1 พบว่ามีสมการดังนี้

ถังที่ 1 $9x_1 - 3x_3 = 120$

ถังที่ 2 $4x_1 - 4x_2 = 0$

ถังที่ 3 $-2x_2 + 9x_3 = 350$

ถังที่ 4 $x_2 + 6x_3 - 9x_4 + 2x_5 = 0$

ถังที่ 5 $5x_1 + 1x_2 - 6x_5 = 0$

จงหาความเข้มข้นของสารในถังต่างๆ ด้วยวิธีกฎของคราเมอร์

วิธีทำ

เขียนให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ดังสมการ (E4.5-1)

$$\begin{bmatrix} 9 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 4 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & -9 & 2 \\ 5 & 1 & 0 & 0 & -6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 0 \\ 350 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{E4.5-1}$$

ดังนั้น

$$x_1 = \frac{\det[A]_1}{\det[A]} = \frac{\begin{vmatrix} 120 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 350 & -2 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & -9 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -6 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 9 & 0 & -3 & 0 & 0 \\ 4 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 9 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & -9 & 2 \\ 5 & 1 & 0 & 0 & -6 \end{vmatrix}} = \frac{-460080}{-16200} = 28.4$$

สำหรับ x_2 x_3 x_4 และ x_5 สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน

$$x_2 = \frac{\det[A]_2}{\det[A]} = \frac{-460080}{-16200} = 28.4$$

$$x_3 = \frac{\det[A]_3}{\det[A]} = \frac{-732240}{-16200} = 45.2$$

$$x_4 = \frac{\det[A]_4}{\det[A]} = \frac{-641520}{-16200} = 39.6$$

$$x_5 = \frac{\det[A]_5}{\det[A]} = \frac{-460080}{-16200} = 28.4$$

ดังนั้นความเข้มข้นของสารในถังที่ 1 2 3 4 และ 5 มีค่าเท่ากับ 28.4 28.4 45.2 39.6 และ 28.4 g/L

ตัวอย่างที่ 4.6 การกลั่นสารผสมระหว่าง Methanol (M), water (W) และ Benzene (B) ด้วยหอกลั่นจำนวน 2 หอ จากตัวอย่างที่ 4.3 พบว่าสมดุลโมลของสารต่างๆ ดังนี้

$$F_2 + F_3 + F_4 = 10$$

$$0.04F_2 + 0.26F_3 + 0.54F_4 = 2$$

$$0.93F_2 + 0F_3 + 0.24F_4 = 6$$

$$0.03F_2 + 0.74F_3 + 0.22F_4 = 2$$

จงหาอัตราการไหลเชิงโมลทั้งหมดของสาย F_2 F_3 และ F_4

วิธีทำ

เขียนให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ดังสมการ (E4.6-1)

$$\begin{bmatrix} 0.04 & 0.26 & 0.54 \\ 0.93 & 0 & 0.24 \\ 0.03 & 0.74 & 0.22 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2 \\ F_3 \\ F_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{E4.6-1}$$

ดังนั้น

$$F_2 = \frac{\det[A]_1}{\det[A]} = \frac{\begin{vmatrix} 2 & 0.26 & 0.54 \\ 6 & 0 & 0.24 \\ 2 & 0.74 & 0.22 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 0.04 & 0.26 & 0.54 \\ 0.93 & 0 & 0.24 \\ 0.03 & 0.74 & 0.22 \end{vmatrix}} = \frac{1.824}{0.3132} = 5.8238$$

สำหรับ F_3 และ F_4 สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน

$$F_3 = \frac{\det[A]_2}{\det[A]} = \frac{0.546}{0.3132} = 1.7432$$

$$F_4 = \frac{\det[A]_3}{\det[A]} = \frac{0.762}{0.3132} = 2.4330$$

ดังนั้นอัตราการไหลเชิงโมลทั้งหมดของสาย F_2 F_3 และ F_4 มีค่าเท่ากับ 5.8238 1.7432 และ 2.4330 mol/min

ตัวอย่างที่ 4.7 กระบวนการสกัดกรดอะซิติกที่ละลายในน้ำด้วยบิวทานอล โดยป้อนแบบไหลสวนทางกัน เมื่อสายป้อนประกอบด้วยกรดอะซิติก 1.2 wt% ที่อัตราการป้อน 100 kg/min ในขณะที่สายสกัดป้อนบิวทานอลบริสุทธิ์ที่อัตรากการป้อน 75 kg/min ถ้าถังสกัดมีจำนวน 3 ถัง จงหาความเข้มข้นของกรดอะซิติกในสารสกัดและความเข้มข้นของกรดอะซิติกในน้ำที่เหลืออยู่ เมื่อค่าคงที่ในการสกัดมีค่าเท่ากับ 1.613

วิธีทำ

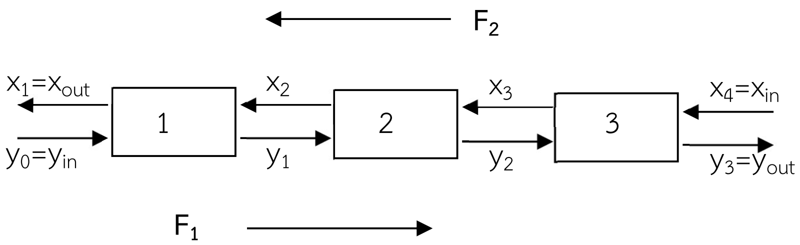
จากตัวอย่างที่ 4.4 สมดุลมวลสารในแต่ละถัง สมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นน้ำและสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอลได้ดังสมการ (E4.7-1) (E4.7-2) และ (E4.7-3) ตามลำดับ และสามารถเขียนแผนภาพประกอบได้ดังรูปที่ E4.7-1

$$y_{i-1} + \frac{F_2}{F_1} x_{i+1} = y_i + \frac{F_2}{F_1} x_i \tag{E4.7-1}$$

$$y_{i-1}-\left(1+\frac{F_2}{F_1}K\right)y_i+\left(\frac{F_2}{F_1}K\right)y_{i+1}=0 \qquad \text{(E4.7-2)}$$

$$\frac{F_1}{F_2K}x_{i-1}-\left(\frac{F_1}{F_2K}+1\right)x_i+x_{i+1}=0 \qquad \text{(E4.7-3)}$$

เมื่อ y คือสัดส่วนมวลของกรดอะซิติกในชั้นน้ำ และ x คือสัดส่วนมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอล เนื่องจากมีจำนวนถังสกัด 5 ถัง และ K เท่ากับ 1.613 F_1 เท่ากับ 100 kg/min F_2 เท่ากับ 75 kg/min y_{in} เท่ากับ 1.2 wt% และ x_{in} เท่ากับ 0 wt%



รูปที่ E4.7-1 แผนภาพการทำสมดุลโมลของการสกัด

การหาสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นน้ำ

สำหรับถังสกัดใบแรก ถึง ถังสกัดก่อนใบสุดท้าย หรือ ถังสกัดใบที่ 1 และ ใบที่ 2 สามารถใช้สมการ (E4.7-2)

$$y_{i-1}-\left(1+\frac{75}{100}1.613\right)y_i+\left(\frac{75}{100}1.613\right)y_{i+1}=0$$

$$y_{i-1}-2.2098y_i+1.2098y_{i+1}=0$$

ถังสกัดใบที่ 1

$y_0-2.2098y_1+1.2098y_2=0$ หรือ $y_{in}-2.2098y_1+1.2098y_2=0$ หรือ

$$-2.2098y_1+1.2098y_2=-\frac{1.2}{100}=-0.012$$

ถังสกัดใบที่ 2

$$y_1-2.2098y_2+1.2098y_3=0$$

สำหรับถังสกัดใบสุดท้าย หรือ ถังสกัดใบที่ 3 สามารถใช้สมการ (E4.7-1) ในการหาสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นน้ำ

$y_{i-1}+\frac{F_2}{F_1}x_{i+1}=y_i+\frac{F_2}{F_1}x_i$ หรือ $y_{i-1}+\frac{F_2}{F_1}x_{i+1}=y_i+\frac{F_2}{F_1}Ky_i=\left(1+\frac{F_2}{F_1}K\right)y_i$

$y_{i-1}+\frac{75}{100}x_{i+1}=\left(1+\frac{75}{100}1.613\right)y_i$ หรือ $y_{i-1}-2.2098y_i=0.75x_{i+1}$ ดังนั้น

$$y_2 - 2.2098y_3 = 0.75x_4 = 0.75x_{in} = 0$$

เขียนสมการต่อไปนี้ให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ดังสมการ (E4.7-4)

$$-2.2098y_1 + 1.2098y_2 = -0.012$$

$$y_1 - 2.2098y_2 + 1.2098y_3 = 0$$

$$y_2 - 2.2098y_3 = 0$$

$$\begin{bmatrix} -2.2098 & 1.2098 & 0 \\ 1 & -2.2098 & 1.2098 \\ 0 & 1 & -2.2098 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.012 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{E4.7-4}$$

ดังนั้น

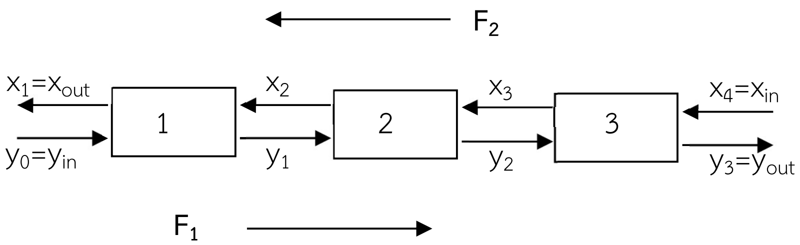
$$y_1 = \frac{\det[A]_1}{\det[A]} = \frac{\begin{vmatrix} -0.012 & 1.2098 & 0 \\ 0 & -2.2098 & 1.2098 \\ 0 & 1 & -2.2098 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -2.2098 & 1.2098 & 0 \\ 1 & -2.2098 & 1.2098 \\ 0 & 1 & -2.2098 \end{vmatrix}} = \frac{-0.04408}{-5.4441} = 0.008097$$

สำหรับ F_3 และ F_4 สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน

$$y_2 = \frac{\det[A]_2}{\det[A]} = \frac{-0.02652}{-5.4441} = 0.004871$$

$$y_3 = \frac{\det[A]_3}{\det[A]} = \frac{-0.012}{-5.4441} = 0.002204$$

ดังนั้นสัดส่วนมวลของกรดอะซิติกในชั้นน้ำของ y_1 y_2 และ y_3 (y_{out}) มีค่าเท่ากับ 0.8097 0.4871 และ 0.2204 wt%



การหาสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอล

สำหรับถังสกัดใบแรก หรือ ถังสกัดใบที่ 1 สามารถใช้สมการ (E4.7-1) ในการหาสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอล

$$y_{i-1} + \frac{F_2}{F_1}x_{i+1} = y_i + \frac{F_2}{F_1}x_i \tag{E4.7-1}$$

$\frac{F_1}{F_2}y_{i-1}+x_{i+1}=\frac{F_1}{F_2}y_i+x_i$ หรือ $\frac{F_1}{F_2}y_{i-1}+x_{i+1}=\frac{F_1}{F_2}\frac{x_i}{K}+x_i$

ดังนั้น สมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอลของถังสกัดใบที่ 1

$$\frac{F_1}{F_2}y_0+x_2=\left(\frac{F_1}{F_2K}+1\right)x_1$$

$\frac{100}{75}\left(\frac{1.2}{100}\right)+x_2=\left(\frac{100}{75(1.613)}+1\right)x_1$ หรือ $0.016+x_2=0.8266x_1$

$$0.8266x_1-x_2=0.016$$

สำหรับถังสกัดใบที่ 2 ถึงถังสกัดใบสุดท้าย สามารถใช้สมการ (E4.7-3) ในการหาสมดุลมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอล

$$\frac{F_1}{F_2K}x_{i-1}-\left(\frac{F_1}{F_2K}+1\right)x_i+x_{i+1}=0 \qquad \text{(E4.7-3)}$$

$\frac{100}{75x1.613}x_{i-1}-\left(\frac{100}{75x1.613}+1\right)x_i+x_{i+1}=0$ หรือ $0.8266x_{i-1}-1.8266x_i+x_{i+1}=0$

ถังสกัดใบที่ 2

$$0.8266x_1-1.8266x_2+x_3=0$$

ถังสกัดใบที่ 4

$0.8266x_2-1.8266x_3+x_4=0$ หรือ $0.8266x_2-1.8266x_3=0$

เขียนสมการต่อไปนี้ให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์ดังสมการ (E4.7-4)

$$0.8266x_1-x_2=0.016$$

$$0.8266x_1-1.8266x_2+x_3=0$$

$$0.8266x_2-1.8266x_3=0$$

$$\begin{bmatrix}0.8266 & -1 & 0\\ 0.8266 & -1.8266 & 1\\ 0 & 0.8266 & -1.8266\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.016\\ 0\\ 0\end{bmatrix} \qquad \text{(E4.7-5)}$$

ดังนั้น

$$x_1=\frac{\det[A]_1}{\det[A]}=\frac{\begin{vmatrix}0.016 & -1 & 0\\ 0 & -1.8266 & 1\\ 0 & 0.8266 & -1.8266\end{vmatrix}}{\begin{vmatrix}0.8266 & -1 & 0\\ 0.8266 & -1.8266 & 1\\ 0 & 0.8266 & -1.8266\end{vmatrix}}=\frac{0.040158}{0.564789}=0.071102$$

สำหรับ F_3 และ F_4 สามารถหาได้ในทำนองเดียวกัน

$$x_2 = \frac{\det[A]_2}{\det[A]} = \frac{0.024158}{0.564789} = 0.042773$$

$$x_3 = \frac{\det[A]_3}{\det[A]} = \frac{0.010932}{0.564789} = 0.019356$$

ดังนั้นสัดส่วนมวลของกรดอะซิติกในชั้นบิวทานอลของ x_1 (x_{out}) x_2 และ x_3 มีค่าเท่ากับ 7.112 4.2773 และ 1.9356 wt%

4.6 ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ (Gauss Elimination) เป็นวิธีการดำเนินการเบื้องต้นแบบแถวกับเมตริกซ์แต่งเติมของระบบสมการเพื่อให้กลายเป็นเมตริกซ์แบบขั้นบันไดแล้วเขียนผลเฉลย วิธีการแบบนี้จำเป็นต้องมีจำนวนสมการเท่ากับจำนวนตัวแปร ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์สามารถแบ่งขั้นตอนวิธีการดำเนินการดังนี้

ขั้นที่ 1. เขียนระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์

$$\begin{aligned}
&a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1 \\
&a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2 \\
&a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \ldots + a_{3n}x_n = b_3 \\
&\quad\vdots \\
&a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n
\end{aligned}$$

ดังนั้น

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

ขั้นที่ 2. จัดรูปเมตริกซ์ที่ได้จากขั้นที่ 1 โดยกำจัดตัวแปรในแต่ละสมการ เพื่อให้ได้เมตริกซ์แบบขั้นบันได

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & \cdots & a'_{2n} \\ 0 & 0 & a'_{33} & \cdots & a'_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix}$$

ขั้นที่ 3 เป็นการแทนค่าย้อนกลับจากเมตริกซ์แบบขั้นบันไดที่ได้จากขั้นที่ 2

$$x_n = \frac{b'_n}{a'_{nn}}$$

$$x_{n-1} = \frac{b'_{n-1} - a'_{n-1,n}\, x_n}{a'_{n-1,n-1}}$$

$$x_2 = \frac{b'_2 - \left(a'_{23}\, x_3 + a'_{24}\, x_4 + \cdots + a'_{2n}\, x_n\right)}{a'_{22}}$$

$$x_1 = \frac{b'_1 - \left(a'_{12}\, x_2 + a'_{13}\, x_3 + \cdots + a'_{1n}\, x_n\right)}{a'_{11}}$$

ตัวอย่างที่ 4.8 จากสมดุลมวลของความเข้มข้นของกลิ่นกาสะลองในแต่ละห้องในตัวอย่างที่ 4.2 ดังนี้

ห้องที่ 1 $200C_1 - 50C_2 = 100$

ห้องที่ 2 $-50C_1 + 200C_2 - 50C_3 = 1500$

ห้องที่ 3 $-50C_2 + 50C_3 = 2000$

จงหาความเข้มข้นของกลิ่นกาสะลองในแต่ละห้องด้วยระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

วิธีทำ

ขั้นที่ 1 เขียนระบบสมการเชิงเส้นให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์

$$\begin{bmatrix} 200 & -50 & 0 \\ -50 & 200 & -50 \\ 0 & -50 & 50 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 100 \\ 1500 \\ 200 \end{bmatrix}$$

ปรับให้เป็นตัวเลขที่ง่ายขึ้น

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 30 \\ 4 \end{bmatrix}$$

ขั้นที่ 2 จัดรูปเมตริกซ์ที่ได้จากขั้นที่ 1 โดยกำจัดตัวแปรในแต่ละสมการ เพื่อให้ได้เมตริกซ์แบบขั้นบันได

กำจัด x_1 ในแถวที่ 2 โดย R_2x4 + R_1

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ 0 & 15 & -4 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 122 \\ 4 \end{bmatrix}$$

กำจัด x_2 ในแถวที่ 3 โดย R_3x15 + R_2

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 \\ 0 & 15 & -4 \\ 0 & 0 & 11 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 122 \\ 182 \end{bmatrix}$$

ขั้นที่ 3 แทนค่ากลับ

$$C_3 = \frac{180}{11} = 16.5454$$

$$C_2 = \frac{122 + 4C_3}{15} = \frac{122 + 4(16.54545)}{15} = 12.54545$$

$$C_1 = \frac{2 + C_2}{4} = \frac{2 + 12.54545}{4} = 3.63636$$

ดังนั้นความเข้มข้นของของกลิ่นกาสะลองในแต่ละห้องดังนี้ C_1 C_2 และ C_3 มีค่าเท่ากับ 3.63636 12.54545 และ 16.54545 g/L ตามลำดับ

4.6.1 ระบบสมการเชิงเส้นที่มีสภาพไม่เหมาะสม

การหาผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้นสามารถหาได้ด้วยระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ แต่บางครั้งอาจเกิดปัญหาขึ้น เช่น การหารด้วยศูนย์ หรือ ปัญหาจากการปัดเศษในระหว่างการคำนวณ หรือสมการที่มีสภาพไม่เหมาะสมในการแก้ด้วยระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

1. ปัญหาจากตัวหารเป็นศูนย์

ในบางสมการที่มีตัวหารเป็นศูนย์ตั้งแต่เริ่มแรก เช่น

$$\begin{aligned} 2x_2 + 3x_3 &= 8 \\ 4x_1 + 6x_2 + 7x_3 &= -3 \\ 2x_1 - 3x_2 + 6x_3 &= 5 \end{aligned}$$

จากระบบสมการเชิงเส้นข้างบนพบว่า สมการแรก พบว่าสัมประสิทธิ์หน้าตัวแปร x_1 มีค่าเท่ากับ 0 ดังนั้นจะทำให้ไม่สามารถหาค่า x_1

2. ปัญหาจากการปัดเศษ

ตัวอย่างเช่นปัญหาของระบบสมการเชิงเส้นที่เกิดจากการปัดเศษ ซึ่งมักพบในระบบสมการเชิงเส้นที่มีจำนวนตัวแปรมาก ดังนั้นการใช้ทศนิยม 2 ตำแหน่ง หรือ 3 ตำแหน่ง มีผลต่อการคำนวณ เช่น

$$\begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0.1 & 7 & -0.3 \\ 0.3 & -0.2 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.85 \\ -19.3 \\ 71.4 \end{bmatrix}$$

เมื่อใช้ระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์

$$\begin{bmatrix} 3 & -0.1 & -0.2 \\ 0 & 7.00333 & -0.29333 \\ 0 & 0 & 10.0120 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.85 \\ -19.5617 \\ 70.0843 \end{bmatrix}$$

ซึ่งจะเห็นได้ว่า

$$x_3 = \frac{70.0843}{10.0120} = 7.0000299964$$

ซึ่งจะเห็นได้ว่า x_3 มีทศนิยมมากกว่า 5 ตำแหน่ง ทำให้จำเป็นต้องปัดเศษ เพื่อหาค่าของ x_2 และ x_1 ตามลำดับ

3. สมการที่มีสภาพไม่เหมาะสม

สมการที่ไม่เหมาะสม (Ill-Conditioned Systems) เป็นสภาพที่เกิดจากสมการเชิงเส้นที่มีค่าความชันของกราฟใกล้เคียงกัน ดังรูปที่ 4.7 (ค) ดังนั้นการหาผลเฉลยเป็นไปได้ยาก นอกจากนี้ยังมีผลจากปัญหาจากการปัดเศษ เช่น

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1.1 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10.4 \end{bmatrix}$$

ซึ่งพบว่า

$$x_1 = \frac{2(10)-2(10.4)}{1(2)-2(1.1)} = 4$$

$$x_2 = \frac{1(10.4)-1.1(10)}{1(2)-2(1.1)} = 3$$

แต่ถ้าระบบสมการเชิงเส้นเป็น

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1.05 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 10.4 \end{bmatrix}$$

ซึ่งพบว่า

$$x_1 = \frac{2(10)-2(10.4)}{1(2)-2(1.05)} = 8$$

$$x_2 = \frac{1(10.4)-1.1(10)}{1(2)-2(1.05)} = 1$$

จากทั้ง 2 ตัวอย่างพบว่าเมื่อสัมประสิทธิ์หน้าของ a_{21} เปลี่ยนจาก 1.1 เป็น 1.05 มีผลต่อการเปลี่ยนแปลงของค่า x_1 และ x_2

4.6.2 เทคนิคการแก้ระบบสมการเชิงเส้นให้มีสภาพที่เหมาะสม

ระบบสมการเชิงเส้นที่มีสภาพไม่เหมาะสมสามารถปรับให้ระบบสมการเชิงเส้นมีสภาพที่เหมาะสมได้ โดย 1. การเลือกตัวยืนบางส่วน 2. การปรับสเกล และ 3. วิธีตัดออกโดยเลือกตัวยืนที่มีค่ามากที่สุดในแถว

1. การเลือกตัวยืนบางส่วน

ถ้าระบบสมการเชิงเส้นมีสมาชิกตัวหลักที่อยู่ในแนวแทยงมุมเป็น 0 หรือมีค่าเข้าใกล้ศูนย์ ก็จะทำให้ไม่สามารถหาผลเฉลยของตัวแปรนั้นได้ ปัญหานี้แก้ได้โดยการหาสมาชิกในหลักที่อยู่ใต้แนวแทยงมุมตัวแรกที่ไม่เป็น 0 หรือมีค่าเข้าใกล้ศูนย์ แล้วสลับแถวนั้น และวิธีการหาตัวมาสลับนี้เรียกว่าการหาตัวหลัก (partial pivoting)

จากระบบสมการเชิงเส้น

$$\begin{bmatrix} 0.0003 & 3.0000 \\ 1.0000 & 1.0000 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.0001 \\ 1.0000 \end{bmatrix}$$

ซึ่งผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้นนี้คือ x_1 และ x_2 มีค่าเท่ากับ 1/3 และ 2/3 ตามลำดับ

เมื่อจัดรูปสมการตามระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ โดย R_2-R_1/0.0003 ได้เป็น

$$\begin{bmatrix} 0.0003 & 3.0000 \\ 0 & -9999 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.0001 \\ -6666 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$x_2 = \frac{-6666}{-9999} = \frac{2}{3}$$

$$x_1 = \frac{2.0001 - 3(2/3)}{0.0003}$$

เนื่องจาก (2/3) เมื่อแปลงเป็นจำนวนเลขพบว่าผลของตำแหน่งทศนิยมดังนี้

ตารางที่ 4.1 ผลของจำนวนเลขทศนิยม

จำนวนเลขทศนิยม	x_2	x_1
3 ตำแหน่ง	0.667	-3.333
4 ตำแหน่ง	0.6667	0.0000
5 ตำแหน่ง	0.66667	0.30000
6 ตำแหน่ง	0.666667	0.330000
7 ตำแหน่ง	0.6666667	0.3330000

ในทางกลับกันถ้าเรียงลำดับสมการใหม่ ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1.0000 & 1.0000 \\ 0.0003 & 3.0000 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0000 \\ 2.0001 \end{bmatrix}$$

เมื่อจัดรูปสมการตามระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ โดย R_2/0.0003 -R_1ได้เป็น

$$\begin{bmatrix} 1.0000 & 1.0000 \\ 0 & 9999 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.000 \\ 6666 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$x_2 = \frac{6666}{9999} = \frac{2}{3}$$

$$x_1 = \frac{1 - 1(2/3)}{1}$$

เนื่องจาก (2/3) เมื่อแปลงเป็นจำนวนเลขพบว่าผลของตำแหน่งทศนิยมดังนี้

ตารางที่ 4.2 ผลของจำนวนเลขทศนิยม

จำนวนเลขทศนิยม	x_2	x_1
3 ตำแหน่ง	0.667	0.333
4 ตำแหน่ง	0.6667	0.3333
5 ตำแหน่ง	0.66667	0.33333

6 ตำแหน่ง	0.666667	0.333333
7 ตำแหน่ง	0.6666667	0.3333333

จากตัวอย่างนี้จะเห็นได้ว่า ถ้าต้องการให้ผลเฉลยมีความคลาดเคลื่อนต่ำ จำเป็นต้องเลือก สัมประสิทธิ์ที่ให้ค่าสูงสุดในแถวนั้น ซึ่งเรียกวิธีการนี้ว่าการเลือกตัวยืนบางส่วน

2. การปรับสเกล

จากระบบสมการเชิงเส้น

$$\begin{bmatrix} 2 & 100,000 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 100,000 \\ 2 \end{bmatrix}$$

เมื่อจัดรูปสมการตามระเบียบวิธีการกำจัดแบบเกาส์ โดย $R_2 - 0.5R_1$

$$2x_1 + 100,000x_2 = 100,000$$

$$-50,000x_2 = -50,000$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 100,000 \\ 0 & -50,000 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 100,000 \\ -50,000 \end{bmatrix}$$

หรือ

จากระบบสมการเชิงเส้น

$$\begin{bmatrix} -0.001 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1.00 \\ 2.001 \end{bmatrix}$$

ซึ่งผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้นนี้คือ x_1 และ x_2 มีค่าเท่ากับ 1.00 และ 1.001 ตามลำดับ

4.7 การหาคำตอบสำหรับเมตริกซ์แถบ

รูปแบบที่พบในการคำนวณทางวิศวกรรมเคมี เมื่อนำระบบสมการมาเขียนในรูปของเมตริกซ์จะอยู่ในรูปของเมตริกซ์แถบ

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & & & & \\ e_2 & f_2 & g_2 & & & \\ & e_3 & f_3 & g_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & e_{n-1} & f_{n-1} & g_{n-1} \\ & & & & e_n & f_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

สำหรับการแก้ระบบสมการของเมตริกซ์แถบสามารถทำได้ดังนี้

โดยการกำจัดสัมประสิทธิ์ e_2 โดย R_2f_1 - R_1e_2

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & & & & \\ & f'_2 & g'_2 & & & \\ & e_3 & f_3 & g_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & e_{n-1} & f_{n-1} & g_{n-1} \\ & & & & e_n & f_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

เมื่อ $f'_2 = f_2 f_1 - g_1 e_2$ $g'_2 = g_2 f_1$ และ $b'_2 = b_2 f_1 - b_1 e_2$

ดังนั้นเมื่อจัดรูปไปเรื่อยๆ พบว่า

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & & & & \\ & f'_2 & g'_2 & & & \\ & & f'_3 & g'_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & f'_{n-1} & g'_{n-1} \\ & & & & & f'_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b'_2 \\ b'_3 \\ \vdots \\ b'_{n-1} \\ b'_n \end{bmatrix}$$

เมื่อ $f'_3 = f_3 f'_2 - g'_2 e_3$ $g'_3 = g_3 f'_2$ และ $b'_3 = b_3 f'_2 - b'_2 e_3$

$f'_{n-1} = f_{n-1} f'_{n-2} - g'_{n-2} e_{n-1}$ $g'_{n-1} = g_{n-1} f'_{n-2}$ และ $b'_{n-1} = b_{n-1} f'_{n-2} - b'_{n-2} e_{n-1}$

$f'_n = f_n f'_{n-1} - g_{n-1} e_n$ และ $b'_n = b_n f'_{n-1} - b'_{n-1} e_n$

เพื่อหาคำตอบทำได้โดยดำเนินการแทนค่ากลับ

$$x_n = \frac{b'_n}{f'_n}$$

$$x_{n-1} = \frac{b'_{n-1} - g'_{n-1} x_n}{f'_{n-1}}$$

$$x_2 = \frac{b'_2 - g'_2 x_3}{f'_2}$$

$$x_1 = \frac{b_1 - g_1 x_2}{f_1}$$

ตัวอย่างที่ 4.9 การถ่ายเทมวลสารที่สภาวะคงตัวสำหรับปฏิกิริยาอันดับหนึ่งสามารถเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$D\frac{d^2 C_A}{dx^2} - u\frac{dC_A}{dx} - kC_A = 0 \qquad \text{(E4.9-1)}$$

เมื่อ C_A เป็นความเข้มข้นของสาร A (mol/L) D เป็นสัมประสิทธิ์การแพร่ (m^2/s) u เป็นความเร็วในการเคลื่อนที่ (m/s) และ k ค่าคงที่ปฏิกิริยาอันดับหนึ่ง (s^{-1}) จงเขียนกราฟของความเข้มข้นของสาร A ที่ระยะทางต่างๆ ตั้งแต่ $x = 0$ m ถึง $x = 10$ m โดย x เพิ่มที่ละ 2 m เมื่อกำหนดให้ $C_A\big|_{x=0} = 80$ mol/L $C_A\big|_{x=10} = 10$ mol/L $D = 2$ m^2/s $u = 1$ m/s และ $k = 0.2$ s^{-1}

วิธีทำ

เมื่อ $\dfrac{d^2C_A}{dx^2}=\dfrac{C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}}{\Delta x^2}$ และ $\dfrac{dC_A}{dx}=\dfrac{C_{Ai+1}-C_{Ai-1}}{2\Delta x}$

ดังนั้นสมการ $D\dfrac{d^2C_A}{dx^2}-u\dfrac{dC_A}{dx}-kC_A=0$ สามารถเปลี่ยนได้เป็น (E4.9-1) ได้ดังนี้

$$D\left(\frac{C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}}{\Delta x^2}\right)-u\left(\frac{C_{Ai+1}-C_{Ai-1}}{2\Delta x}\right)-kC_{Ai}=0$$

เมื่อแทนค่าของ $D=2$ m^2/s $u=1$ m/s และ $k=0.2$ s^{-1}และ $\Delta x=2$ m

ดังนั้นเมื่อแทนค่า

$$\frac{D}{\Delta x^2}\left(C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}\right)-\frac{u}{2\Delta x}\left(C_{Ai+1}-C_{Ai-1}\right)-kC_{Ai}=0$$

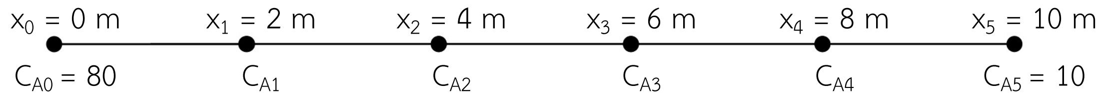
$$\frac{2}{4}\left(C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}\right)-\frac{1}{2(2)}\left(C_{Ai+1}-C_{Ai-1}\right)-0.1C_{Ai}=0$$

$$0.5\left(C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}\right)-0.25\left(C_{Ai+1}-C_{Ai-1}\right)-0.1C_{Ai}=0$$

$$\left(C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}\right)-0.5\left(C_{Ai+1}-C_{Ai-1}\right)-0.4C_{Ai}=0$$

$$C_{Ai+1}-2C_{Ai}+C_{Ai-1}-0.5C_{Ai+1}+0.5C_{Ai-1}-0.4C_{Ai}=0$$

$$1.5C_{Ai-1}-2.4C_{Ai}+0.5C_{Ai+1}=0$$



เมื่อ x_1 = 2 m, C_{A1} mol/L และ x_0 = 0 m, C_{A0} = 80 mol/L

$1.5C_{A0}-2.4C_{A1}+0.5C_{A2}=0$ หรือ $-2.4C_{A1}+0.5C_{A2}=-1.5C_{A0}=-120$

เมื่อ x_2 = 4 m, C_{A2} mol/L

$$1.5C_{A1}-2.4C_{A2}+0.5C_{A3}=0$$

เมื่อ x_3 = 6 m, C_{A3} mol/L

$$1.5C_{A2}-2.4C_{A3}+0.5C_{A4}=0$$

เมื่อ x_4 = 8 m, C_{A4} mol/L และ x_5 = 10 m, C_{A5} = 10 mol/L

$1.5C_{A3}-2.4C_{A4}+0.5C_{A5}=0$ หรือ $1.5C_{A3}-2.4C_{A4}=-0.5C_{A5}=-5$

ดังนั้นสามารถเขียนให้อยู่ในรูปเมตริกซ์ดังนี้

$$\begin{bmatrix}-2.4 & 0.5 & 0 & 0\\ 1.5 & -2.4 & 0.5 & 0\\ 0 & 1.5 & -2.4 & 0.5\\ 0 & 0 & 1.5 & -2.4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}C_{A1}\\ C_{A2}\\ C_{A3}\\ C_{A4}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-120\\ 0\\ 0\\ -5\end{bmatrix}$$

เนื่องจากเป็นรูปแบบของเมตริกซ์แถบ ดังนั้นสามารถเปลี่ยนได้เป็น

$$f'_2=f_2f_1-g_1e_2=(-2.4)(-2.4)-0.5(1.5)=5.76-0.75=5.01$$

$$g'_2 = g_2 f_1 = 0.5(-2.4) = -1.2$$

$$b'_2 = b_2 f_1 - b_1 e_3 = 0(-2.4) - 1.5(-120) = 180$$

$$f'_3 = f_3 f'_2 - g'_2 e_3 = (-2.4)(5.01) - (-1.2)(1.5) = -12.024 + 1.8 = -10.224$$

$$g'_3 = g_3 f'_2 = 0.5(5.01) = 2.505$$

$$b'_3 = b_3 f'_2 - b'_2 e_3 = 0(5.01) - 180(1.5) = -270$$

และ

$$f'_4 = f_4 f'_3 - g'_3 e_4 = (-2.4)(-10.224) - 2.505(1.5) = 24.5376 - 3.7575 = 20.7801$$

$$b'_4 = b_4 f'_3 - b'_3 e_4 = (-5)(-10.224) - (-270)(1.5) = 51.12 + 405 = 456.12$$

$$\begin{bmatrix} -2.4 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 5.01 & -1.2 & 0 \\ 0 & 0 & -10.224 & 2.505 \\ 0 & 0 & 0 & 20.7801 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{A1} \\ C_{A2} \\ C_{A3} \\ C_{A4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -120 \\ 180 \\ -270 \\ 456.12 \end{bmatrix}$$

เพื่อหาคำตอบทำได้โดยดำเนินการแทนค่ากลับ

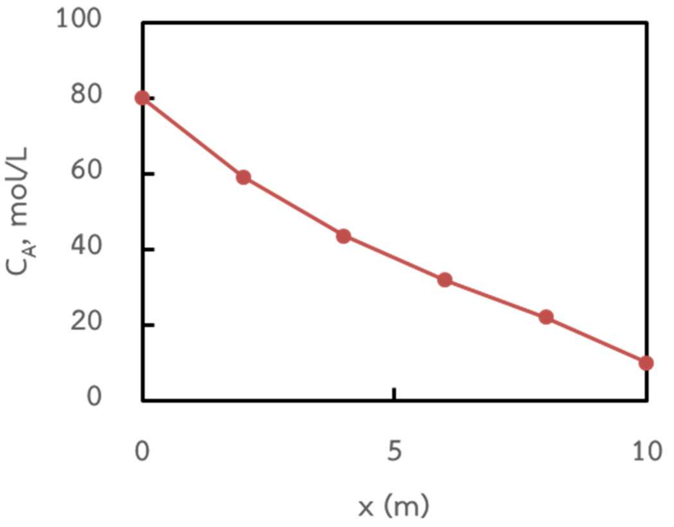
$$C_4 = \frac{b'_4}{f'_4} = \frac{456.12}{20.7801} = 21.9498$$

$$C_3 = \frac{b'_3 - g'_3 C_4}{f'_3} = \frac{(-270) - 2.505(21.9498)}{-10.224} = \frac{-270 - 54.9842}{-10.224} = \frac{-324.9842}{-10.224} = 31.7864$$

$$C_2 = \frac{b'_2 - g'_2 C_3}{f'_2} = \frac{180 - (-1.2)(31.7864)}{5.01} = \frac{180 + 38.1468}{5.01} = \frac{218.1437}{5.01} = 43.5416$$

$$C_1 = \frac{b_1 - g_1 C_2}{f_1} = \frac{-120 - (0.5)(43.5416)}{-2.4} = \frac{-120 - 21.7708}{-2.4} = \frac{-141.7708}{-2.4} = 59.0712$$

ซึ่งสามารถเขียนกราฟความเข้มข้นของสาร A ตามระยะทางดังรูปที่ E4.9-1



รูปที่ E4.9-1 ความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของสาร A กับระยะทางการแพร่

4.8 การแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU

การแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU (LU Factorization) ในขั้นตอนการแทนค่าย้อนกลับในขั้นตอนที่ 3 ถ้าให้ $[U][x]=[d]$ ตัวอย่างสำหรับเมทริกต์ 3x3

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}$$

ถ้าสมมุติให้เมทริกต์ $[L]$ มีสมาชิกดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}$$

ถ้า $[L][U]=[A]$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

ดังนั้น $[A][X]=[B]$

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

หรือ

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}$$

ทำให้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}$$

ซึ่ง

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

เมื่อทราบค่าของเมทริกต์ $[D]$ จะทำให้สามารถหาค่าของ $[X]$ ได้

4.8.1 การหาเมทริกต์ $[L]$ และ $[U]$

ขั้นตอนในการหา $[L]$ และ $[U]$ อาศัยหลักการคูณของเมตริกท์ และมีลำดับขั้นตอนดังนี้

1. พิจารณาแถวที่ 1 ของ $[A]$

$1xu_{11}+0x0+0x0=a_{11}$ ดังนั้น $u_{11}=a_{11}$

$1xu_{12}+0xu_{22}+0x0=a_{12}$ ดังนั้น $u_{12}=a_{12}$

$1xu_{13}+0xu_{23}+0xu_{33}=a_{13}$ ดังนั้น $u_{13}=a_{13}$

ดังนั้น $[U]$ ในแถวที่ 1 ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

2. พิจารณาหลักที่ 1 ของ $[A]$

$l_{21}xu_{11}+1x0+0x0=a_{21}$ ดังนั้น $l_{21}=\dfrac{a_{21}}{a_{11}}$

$l_{31}xa_{11}+l_{32}x0+1x0=a_{31}$ ดังนั้น $l_{31}=\dfrac{a_{31}}{a_{11}}$

ดังนั้น $[L]$ ในหลักที่ 1 ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

3. พิจารณาหาค่าของ u_{22} และ u_{23}

$\dfrac{a_{21}}{a_{11}}xa_{12}+1xu_{22}+0x0=a_{22}$ ดังนั้น $u_{22}=a_{22}-\dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}$

$\dfrac{a_{21}}{a_{11}}xa_{13}+1xu_{23}+0xu_{33}=a_{23}$ ดังนั้น $u_{23}=a_{23}-\dfrac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}$

ดังนั้น u_{22} และ u_{23} ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

4. พิจารณาหาค่าของ l_{32}

$$\frac{a_{31}}{a_{11}}xa_{12}+l_{32}x\left(a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}\right)+1x0=a_{32} \text{ ดังนั้น } l_{32}=\frac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right)}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}}$$

ดังนั้นแทนค่า l_{32} ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & \frac{\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

5. พิจารณาหาค่าของ u_{33}

$$\frac{a_{31}}{a_{11}}xa_{13}+\frac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right)}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}}x\left(a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}\right)+1xu_{33}=a_{33}$$

ดังนั้น

$$u_{33}=a_{33}-\frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}}-\frac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right)\left(a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}\right)}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}}$$

ดังนั้นแทนค่า l_{32} ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & \frac{\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33}-\frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}}-\frac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right)\left(a_{23}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}\right)}{a_{22}-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

สำหรับการคำนวณหา LU สามารถคำนวณได้จาก https://mxncalc.com/lu-factorization-calculator

4.8.2 การหาเมทริกต์ $[D]$

สำหรับการหาเมทริกต์ $[D]$ สามารถทำได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

1. หาค่า d_1

$1xd_1 + 0xd_2 + 0xd_3 = b_1$ ดังนั้น $d_1 = b_1$

2. หาค่า d_2

$l_{21}xd_1 + 1xd_2 + 0xd_3 = b_2$ ดังนั้น $d_2 = b_2 - l_{21}d_1 = b_2 - l_{21}b_1$

3. หาค่า d_3

$l_{31}xd_1 + l_{32}xd_2 + 1xd_3 = b_3$ ดังนั้น $+1xd_3 = b_3 - l_{31}d_1 - l_{32}d_2 = b_3 - l_{31}b_1 - l_{32}\left(b_2 - l_{21}b_1\right)$

ดังนั้นเมทริกต์ $[D]$ มีสมาชิกดังนี้

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 - l_{21}b_1 \\ b_3 - l_{31}b_1 - l_{32}\left(b_2 - l_{21}b_1\right) \end{bmatrix}$$

4.8.3 การหาคำตอบของเมทริกต์ $[x]$

จาก $[U][x] = [d]$

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12} & a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33} - \dfrac{a_{31}a_{13}}{a_{11}} - \dfrac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right)\left(a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}\right)}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 - l_{21}b_1 \\ b_3 - l_{31}b_1 - l_{32}\left(b_2 - l_{21}b_1\right) \end{bmatrix}$$

ตัวอย่างที่ 4.10 ในการทดลองการสกัดนิเกิลจากสารละลายน้ำด้วยตัวทำละลายอินทรีย์ให้ผลของความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำและเฟสสารอินทรีย์ดังตารางที่ E4.10-1

ตารางที่ E4.10-1 ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำและเฟสสารอินทรีย์

ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำ (g/L)	2	2.5	3
ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ (g/L)	8.57	10	12

ถ้าให้ y เป็นความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ และ x เป็นความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำ ซึ่งเป็นไปตามสมการดังต่อไปนี้ $y = ax^2 + bx + c$ เมื่อ a b และ c เป็นค่าคงที่ จงหาความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ เมื่อความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.3 g/L

วิธีทำ

จากตารางที่ E4.10-1 สามารถเขียนเป็นสมการดังนี้

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 8.57 g/L

$8.57 = a2^2 + b2 + c = 4a + 2b + c$

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.5 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 10 g/L

$10 = a2.5^2 + b2.5 + c = 6.25a + 2.5b + c$

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.5 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 10 g/L

$12 = a3^2 + b3 + c = 9a + 3b + c$

ดังนั้นสามารถเขียนเป็นเมทริกต์ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 6.25 & 2.5 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.57 \\ 10 \\ 12 \end{bmatrix}$$

1. หาเมทริกต์ $[U]$

$$[U] = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} & a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{13} \\ 0 & 0 & a_{33} - \dfrac{a_{31}a_{13}}{a_{11}} - \dfrac{\left(\frac{a_{31}}{a_{11}} a_{12}\right)\left(a_{23} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{13}\right)}{a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12}} \end{bmatrix}$$

$$[U] = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & 2.5 - \dfrac{6.25}{4}2 = -0.625 & 1 - \dfrac{6.25}{4}1 = -0.5625 \\ 0 & 0 & 1 - \dfrac{9(1)}{4} - \dfrac{\left(\frac{9}{4}2\right)(-0.5625)}{-0.625}1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & -0.625 & -0.5625 \\ 0 & 0 & 0.1 \end{bmatrix}$$

2. หาเมทริกต์ $[L]$

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ l_{31} = \frac{a_{31}}{a_{11}} & \dfrac{l_{31}a_{12}}{a_{32} - l_{21}a_{12}} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{6.25}{4} & 1 & 0 \\ \frac{9}{4} & \dfrac{\frac{9}{4}2}{2.5 - \frac{6.25}{4}2} & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1.5625 & 1 & 0 \\ 2.25 & 2.4 & 1 \end{bmatrix}$$

3. หาเมทริกต์ $[D]$

$$\begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 - l_{21}b_1 \\ b_3 - l_{31}b_1 - l_{32}\left(b_2 - l_{21}b_1\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.57 \\ 10 - 1.5625(8.57) = -3.3906 \\ 12 - 2.25(8.57) - 2.4\left(-3.3906\right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.57 \\ -3.3906 \\ 0.855 \end{bmatrix}$$

4. การแทนค่าย้อนกลับเพื่อหาคำตอบ

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 0 & -0.625 & -0.5625 \\ 0 & 0 & 0.1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.57 \\ -3.3906 \\ 0.855 \end{bmatrix}$$

$$c = \frac{0.855}{0.1} 8.55$$

$$b = \frac{d_2 - u_{23}c}{u_{22}} = \frac{-3.3906 - (-0.5625)8.55}{-0.625} = \frac{1.4188}{-0.625} = -2.27$$

$$a = \frac{d_1 - u_{12}b - u_{13}c}{u_{11}} = \frac{8.57 - 2(-2.27) - (1)8.55}{4} = \frac{4.56}{4} = 1.14$$

ดังนั้นสมการ $y = ax^2 + bx + c$ ได้เป็น

$$y = 1.14x^2 - 2.27x + 8.55$$

เมื่อความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.3 g/L

$$y = 1.14\left(2.3\right)^2 - 2.27(2.3)x + 8.55 = 9.3596 \text{ g/L}$$

4.9 การแก้ปัญหาโดยการทำซ้ำ

การแก้ปัญหาโดยการทำซ้ำ (Iterative Methods) ได้แก่ วิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ (Jacobi Iterative method) และวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล (Gauss-Seidel method)

4.9.1 วิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

วิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล (Gauss-Seidel method) สามารถเขียนในรูปการแก้สมการสำหรับกรณีเมทริกต์ 3x3 ได้ดังนี้

$[A][x] = [b]$ จะเห็นได้ว่า

สำหรับแถวที่ 1 เพื่อหาค่าของ $x_1^{i+1} = \dfrac{b_1 - a_{12}x_2^i - a_{13}x_3^i}{a_{11}}$

สำหรับแถวที่ 2 เพื่อหาค่าของ $x_2^{i+1} = \dfrac{b_2 - a_{21}x_1^{i+1} - a_{23}x_3^i}{a_{22}}$

สำหรับแถวที่ 3 เพื่อหาค่าของ $x_3^{i+1} = \dfrac{b_3 - a_{31}x_1^{i+1} - a_{32}x_2^{i+1}}{a_{33}}$

โดยทำการแทนค่าซ้ำไปเรื่อย จนกระทั่งค่า $x_1^{i+1}, x_2^{i+1}, x_3^{i+1}$ ไม่มีการเปลี่ยนแปลง

4.9.2 วิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

วิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ (Jacobi Iterative method) เป็นวิธีที่คล้ายกับวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดลเพียงแต่ไม่ได้เปลี่ยนค่าของตัวแปรที่คำนวณหามาได้ก่อนหน้านี้
สำหรับกรณีเมทตริก 3x3 ได้ดังนี้

$[A][x]=[b]$ จะเห็นได้ว่า

สำหรับแถวที่ 1 เพื่อหาค่าของ $x_1^{i+1} = \dfrac{b_1 - a_{12}x_2^i - a_{13}x_3^i}{a_{11}}$

สำหรับแถวที่ 2 เพื่อหาค่าของ $x_2^{i+1} = \dfrac{b_2 - a_{21}x_1^i - a_{23}x_3^i}{a_{22}}$

สำหรับแถวที่ 3 เพื่อหาค่าของ $x_3^{i+1} = \dfrac{b_3 - a_{31}x_1^i - a_{32}x_2^i}{a_{33}}$

โดยทำการแทนค่าซ้ำไปเรื่อย จนกระทั่งค่า $x_1^{i+1}, x_2^{i+1}, x_3^{i+1}$ ไม่มีการเปลี่ยนแปลง

ตัวอย่างที่ 4.11 ในการทดลองการสกัดนิเกิลจากสารละลายน้ำด้วยตัวทำละลายอินทรีย์ให้ผลของความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำและเฟสสารอินทรีย์ดังตารางที่ E4.11-1

ตารางที่ E4.11-1 ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำและเฟสสารอินทรีย์

ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำ (g/L)	2	2.5	3
ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ (g/L)	8.57	10	12

ถ้าให้ y เป็นความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ และ x เป็นความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำ ซึ่งเป็นไปตามสมการดังต่อไปนี้ $x = ay^2 + by + c$ เมื่อ a b และ c เป็นค่าคงที่ จงหาความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์ ถ้าความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำ 2.3 g/L ด้วยวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

วิธีทำ

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 8.57 g/L

$$8.57 = a2^2 + b2 + c = 4a + 2b + c$$

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.5 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 10 g/L

$$10 = a2.5^2 + b2.5 + c = 6.25a + 2.5b + c$$

ที่ความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสน้ำเป็น 2.5 g/L และความเข้มข้นของนิเกิลในเฟสสารอินทรีย์เป็น 10 g/L

$$12 = a3^2 + b3 + c = 9a + 3b + c$$

ดังนั้นสามารถเขียนเป็นเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 6.25 & 2.5 & 1 \\ 9 & 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.57 \\ 10 \\ 12 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$a_{i+1} = \frac{8.57 - 2b_i - c_i}{4} \quad b_{i+1} = \frac{10 - 6.25a_{i+1} - c_i}{2.5} \text{ และ } c_{i+1} = \frac{12 - 9a_{i+1} - 3b_{i+1}}{1}$$

สมมุติให้ a_0 b_0 และ c_0 มีค่าเท่ากับ 1 1 และ 1 ตามลำดับ

รอบที่ 1

$$a_1 = \frac{8.57 - 2(1) - (1)}{4} = 1.3925 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,a}\right| = \left|\frac{1.3925 - 1}{1.3925}\right| x100 = 28.187\%$$

$$b_1 = \frac{10 - 6.25(1.3925) - (1)}{2.5} = 0.11875 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,b}\right| = \left|\frac{0.11875 - 1}{0.11875}\right| x100 = 742.11\%$$

$$c_1 = \frac{12 - 9(1.3925) - 3(0.11875)}{1} = -0.88875 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,c}\right| = \left|\frac{-0.88875 - 1}{-0.88875}\right| x100 = 212.52\%$$

รอบที่ 2 เมื่อ a_1 b_1 และ c_1 มีค่าเท่ากับ 1.3925 0.11875 และ -0.88875 ตามลำดับ

$$a_2 = \frac{8.57 - 2(0.11875) - (-0.88875)}{4} = 2.3053 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,a}\right| = \left|\frac{2.3053 - 1.3925}{2.3053}\right| x100 = 39.596\%$$

$$b_2 = \frac{10 - 6.25(2.3053) - (-0.88875)}{2.5} = -1.4078 \text{ และ }$$

$$\left|\varepsilon_{a,b}\right| = \left|\frac{-1.4078 - 0.11875}{-1.4078}\right| x100 = 108.44\%$$

$$c_2 = \frac{12 - 9(2.3053) - 3(-1.4078)}{1} = -4.5245 \text{ และ }$$

$$\left|\varepsilon_{a,c}\right| = \left|\frac{-4.5245 - (-0.88875)}{-4.5245}\right| x100 = 80.357\%$$

ตารางที่ E4.11-2 ผลการคำนวณหาค่า a b และ c ด้วยวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

รอบที่	a_i	b_i	c_i	$\left\|\varepsilon_{a,a}\right\|$	$\left\|\varepsilon_{a,b}\right\|$	$\left\|\varepsilon_{a,c}\right\|$
0	1.0000	1.0000	1.0000			
1	1.3925	0.1188	-0.8888	28.187%	742.105%	212.518%
2	2.3053	-1.4078	-4.5245	39.596%	108.435%	80.357%
3	3.9775	-4.1340	-11.3956	42.041%	65.946%	60.296%
4	7.0584	-9.0877	-24.2623	43.649%	54.510%	53.032%

จากตารางที่ E4.11-2 พบว่าค่าความคลาดเคลื่อนมีแนวโน้มเข้าสู่ค่าประมาณ 40 – 50 % ดังนั้นจึงจำเป็นต้องปรับการหาค่า a b และ c .โดยการสลับแถวดังนี้

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 & 1 \\ 6.25 & 2.5 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 8.57 \end{bmatrix}$$

ดังนั้น

$$a_{i+1} = \frac{12-3b_i-c_i}{9} \quad b_{i+1} = \frac{10-6.25a_{i+1}-c_i}{2.5} \text{ และ } c_{i+1} = \frac{8.57-4a_{i+1}-2b_{i+1}}{1}$$

รอบที่ 1

สมมุติให้ a_0 b_0 และ c_0 มีค่าเท่ากับ 1 1 และ 1 ตามลำดับ

$$a_1 = \frac{12-3(1)-(1)}{9} = 0.88889 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,a}\right| = \left|\frac{0.88889-1}{0.88889}\right| x100 = 12.5\%$$

$$b_1 = \frac{10-6.25(0.88889)-(1)}{2.5} = 1.3778 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,b}\right| = \left|\frac{1.3778-1}{1.3778}\right| x100 = 27.419\%$$

$$c_1 = \frac{8.57-4(0.88889)-2(1.3778)}{1} = 2.2589 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,c}\right| = \left|\frac{2.2589-1}{2.2589}\right| x100 = 55.730\%$$

รอบที่ 2 เมื่อ a_1 b_1 และ c_1 มีค่าเท่ากับ 0.88889 1.3778 และ 2.2589 ตามลำดับ

$$a_2 = \frac{12-3(1.3778)-1(2.2589)}{9} = 0.62309 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,a}\right| = \left|\frac{0.62309-0.88889}{0.62309}\right| x100 = 42.659\%$$

$$b_2 = \frac{10-6.25(0.62309)-1(2.2589)}{2.5} = 1.5387 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,b}\right| = \left|\frac{1.5387-1.3778}{1.5387}\right| x100 = 10.460\%$$

$$c_1 = \frac{8.57-4(0.62309)-2(1.5387)}{1} = 3.0002 \text{ และ } \left|\varepsilon_{a,c}\right| = \left|\frac{3.0002-2.2589}{3.0002}\right| x100 = 24.709\%$$

ตารางที่ E4.11-3 ผลการคำนวณหาค่า a b และ c ด้วยวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล หลังปรับสมการใหม่สำหรับหาค่า a b และ c

รอบที่	a_i	b_i	c_i	$\left\|\varepsilon_{a,a}\right\|$	$\left\|\varepsilon_{a,b}\right\|$	$\left\|\varepsilon_{a,c}\right\|$
0	1.0000	1.0000	1.0000			
1	0.8889	1.3778	2.2589	12.500%	27.419%	55.730%
2	0.6231	1.5387	3.0002	42.659%	10.460%	24.709%
3	0.4871	1.5822	3.4572	27.926%	2.751%	13.220%
4	0.4218	1.5627	3.7576	15.479%	1.254%	7.993%
100	1.0641	-1.9074	8.1283	0.179%	0.478%	0.130%
200	1.1337	-2.2397	8.5148	0.014%	0.034%	0.010%

จากตารางที่ E4.11-3 พบว่าค่าความคลาดเคลื่อนมีแนวโน้มลดลง ซึ่งพบว่าเมื่อดำเนินการคำนวณหาค่าของ a b และ c ที่รอบ 100 พบว่า ดังนั้นจึงจำเป็นต้องปรับการหาค่า a b และ c .ดังนี้ 1.0641 -1.9074 และ

8.1283 ตามลำดับ เมื่อเปรียบเทียบกับค่าจริงของ a b และ c .ดังนี้ 1.14 -2.27 และ 8.55 ตามลำดับ จะเห็นว่ามีค่าใกล้เคียงมากขึ้น

4.10 ระบบสมการไม่เชิงเส้น

ระบบสมการไม่เชิงเส้น (Nonlinear Systems) เป็นระบบสมการที่มีอันดับหรือเลขยกกำลังไม่เท่ากับ 1 หรือเป็นสมการที่มีฟังก์ชันพิเศษ เช่น พจน์ของ ln exp cos sin เป็นต้น อยู่ในฟังก์ชัน เช่น

$$x_1^2 + x_1x_2 = 10$$

$$x_1^2 + x_1\cos x_2 = 10$$

ดังนั้นการแก้ปัญหาในการหาคำตอบของระบบสมการไม่เชิงเส้นสามารถทำได้หลายวิธี เช่น การเขียนกราฟ ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน วิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ และวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

4.10.1 การแก้ปัญหาระบบสมการไม่เชิงเส้นด้วยการเขียนกราฟ

การเขียนกราฟเป็นวิธีที่เหมาะสมกับระบบสมการที่มีตัวแปรไม่เกิน 3 ตัวแปร แต่ดดยทั่วไปจะใช้กับระบบสมการไม่เชิงเส้นที่มีตัวแปรเพียง 2 ตัวแปร คำตอบของระบบสมการไม่เชิงเส้นคือจุดตัดระหว่างเส้นกราฟทั้งสอง

ตัวอย่างที่ 4.12 ปฏิกิริยาผลิต A + B $\longrightarrow$ C พบว่ามีอัตราการเกิด C เท่ากับ $r_C = 0.5C_AC_B$ mol/L-min แต่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียงคือ 2A +B $\longrightarrow$ D พบว่ามีอัตราการเกิด D เท่ากับ $r_D = 0.05C_A^2$ mol/L-min เมื่อดำเนินปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวน พบว่า ความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ สาร B ที่เวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็นดังนี้

$$C_A = C_{A0} - \left(0.5C_AC_B + 0.1C_A^2\right)\tau$$

$$C_B = C_{B0} - \left(0.5C_AC_B + 0.05C_A^2\right)\tau$$

เมื่อ C_{A0} และ C_{B0} คือความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/Lตามลำดับ C_A และ C_B คือความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/L ตามลำดับ τ คือเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ (min)

จงหาว่าความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับเท่าไร ถ้าความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับ 0.3 และ 0.1 mol/L และเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ 60 min

วิธีทำ

เนื่องจากใช้วิธีการเขียนกราฟเพื่อหาคำตอบของสมการดังนั้นจำเป็นต้องจัดรูปแบบของสมการใหม่ได้เป็น

$$f_1(C_A, C_B) = C_{A0} - \left(0.5C_A C_B + 0.1C_A^2\right)\tau - C_A$$
$$f_2(C_A, C_B) = C_{B0} - \left(0.5C_A C_B + 0.05C_A^2\right)\tau - C_B$$

เมื่อแทนค่าคงที่ต่างจะได้เป็น

$$f_1(C_A, C_B) = 0.3 - 60\left(0.5C_A C_B + 0.1C_A^2\right) - C_A$$
$$f_2(C_A, C_B) = 0.1 - 60\left(0.5C_A C_B + 0.05C_A^2\right) - C_B$$

เมื่อแทนค่า ความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B ที่ค่าต่างๆ พบว่าให้ผลการคำนวณดังตารางที่ E4.12-1 จากตารางที่ E4.12-1 พบว่าจุดตัดของอยู่ระหว่างช่วงค่าของ ความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A เป็น 0.11 – 0.13 mol/L และความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร B เป็น 0.003 – 0.005 mol/L

ตารางที่ E4.102-1 ผลของความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B ที่ค่าต่างๆ ต่อค่าของ $f_1(C_A, C_B)$ และ $f_2(C_A, C_B)$

C_A	C_B	$f_1(C_A, C_B)$	$f_2(C_A, C_B)$
0.3	0.1	-1.440	4.290
0.2	0.05	-0.440	0.703
0.19	0.012	-0.175	0.151
0.18	0.005	-0.101	0.110
0.15	0.005	-0.007	0.096
0.13	**0.005**	**0.049**	**0.088**
0.11	**0.003**	**0.108**	**0.087**
0.11	0.001	0.114	0.096

4.10.2 ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน

ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson method) เป็นระเบียบวิธีที่อาศัยหลักการหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชัน ดังนั้นสำหรับระบบสมการไม่เชิงเส้นสามารถหาอนุพันธ์อันดับหนึ่งของระบบสมการได้ดังนี้

$$f_{1,i+1} = f_{1,i} + (x_{1,i+1} - x_{1,i})\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1} + (x_{2,i+1} - x_{2,i})\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}$$
$$f_{2,i+1} = f_{2,i} + (x_{1,i+1} - x_{1,i})\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1} + (x_{2,i+1} - x_{2,i})\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}$$

เนื่องจากคำตอบของสมการค่าของ $f_{1,i+1}$ และ $f_{2,i+1}$ ต้องมีค่าเท่ากับ 0 ดังนั้นสมการดังกล่าวสามารถจัดรูปได้เป็น

$$\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1}x_{1,i+1}+\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}x_{2,i+1}=-f_{1,i}+x_{1,i}\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1}+x_{2,i}\frac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}$$

$$\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1}x_{1,i+1}+\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}x_{2,i+1}=-f_{2,i}+x_{1,i}\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1}+x_{2,i}\frac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}$$

ดังนั้นเพื่อหาค่าของ $x_{1,i+1}$ และ $x_{2,i+1}$ สามารถใช้วิธีการหาคำตอบด้วยกฎคาร์เมอร์ดังนี้

$$x_{1,i+1}=x_{1,i}-\frac{f_{1,i}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}-f_{2,i}\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}}{\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}-\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1}}$$

$$x_{2,i+1}=x_{2,i}-\frac{f_{2,i}\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1}-f_{1,i}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1}}{\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_1}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_2}-\dfrac{\partial f_{1,i}}{\partial x_2}\dfrac{\partial f_{2,i}}{\partial x_1}}$$

แล้วใช้วิธีการทำซ้ำจนค่าของ $x_{1,i+1}$ และ $x_{2,i+1}$ มีการเปลี่ยนแปลงน้อยมาก

ตัวอย่างที่ 4.13 ปฏิกิริยาผลิต A + B $\longrightarrow$ C พบว่ามีอัตราการเกิด C เท่ากับ $r_C=0.5C_AC_B$ mol/L-min แต่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียงคือ 2A +B $\longrightarrow$ D พบว่ามีอัตราการเกิด D เท่ากับ $r_D=0.05C_A^2C_B$ mol/L-min เมื่อดำเนินปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวน พบว่า ความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ สาร B ที่เวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็นดังนี้

$$C_A=C_{A0}-\left(0.5C_AC_B+0.1C_A^2C_B\right)\tau$$

$$C_B=C_{B0}-\left(0.5C_AC_B+0.05C_A^2C_B\right)\tau$$

เมื่อ C_{A0} และ C_{B0} คือความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/Lตามลำดับ C_A และ C_B คือความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/L ตามลำดับ τ คือเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ (min) จงหาว่าความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับเท่าไร ถ้าความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับ 1.0 และ 0.5 mol/L และเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ 60 min ด้วยระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน

วิธีทำ

จัดรูปแบบของสมการใหม่ได้เป็น

$$f_1(C_A,C_B)=C_{A0}-\left(0.5C_AC_B+0.1C_A^2C_B\right)\tau-C_A$$

$$f_2(C_A,C_B)=C_{B0}-\left(0.5C_AC_B+0.05C_A^2C_B\right)\tau-C_B$$

เมื่อแทนค่าคงที่ต่างจะได้เป็น

$$f_1(C_A,C_B)=1-60\left(0.5C_AC_B+0.1C_A^2C_B\right)-C_A=1-30C_AC_B-6C_A^2C_B-C_A$$
$$f_2(C_A,C_B)=0.5-60\left(0.5C_AC_B+0.05C_A^2C_B\right)-C_B=0.5-30C_AC_B-3C_A^2C_B-C_B$$

หาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งของฟังก์ชันได้ดังนี้

$$\frac{\partial f_1(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-30C_B-12C_AC_B-1$$
$$\frac{\partial f_1(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-30C_A-6C_A^2$$
$$\frac{\partial f_2(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-30C_B-6C_AC_B$$
$$\frac{\partial f_2(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-30C_A-3C_A^2-1$$

ดังนั้นในการคำนวณตามระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันสามารถทำได้ดังนี้

คำนวณรอบที่ 1 จากการคำนวณรอบแรกพบว่า $C_{A,0}$ เท่ากับ 0.2000 mol/L และ $C_{B,0}$ เท่ากับ 0.1000 mol/L ตามลำดับ

$$f_{1,0}(C_A,C_B)=1-30C_{A,0}C_B-6C_{A,0}^2C_{B,0}-C_{A,0}=1-30x0.2x0.1-6x0.2^2x0.1-0.2=0.1760$$
$$f_{2,0}(C_A,C_B)=0.5-30C_{A,0}C_{B,0}-3C_{A,0}^2C_{B,0}-C_{B,0}=0.5-30x0.2x0.1-3x0.2^2x0.1-0.1=-0.2120$$
$$\frac{\partial f_{1,0}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,0}+0.2C_{A,0}C_{B,0}\right)-1=-60(0.5\times0.1+0.2\times0.2\times0.1)-1=-4.2400$$
$$\frac{\partial f_{1,0}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,0}+0.1C_{A,0}^2\right)=-60\left(0.5\times0.2+0.1\times(0.2)^2\right)=-6.2400$$
$$\frac{\partial f_{2,0}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,0}+0.1C_{A,0}C_{B,0}\right)=-60\left(0.5\times0.1+0.1\times0.2\times0.1\right)=-3.1200$$
$$\frac{\partial f_{2,0}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,0}+0.05C_{A,0}^2\right)-1=-60\left(0.5\times0.2+0.05\times(0.2)^2\right)-1=-7.1200$$

$$C_{A,1}=C_{A,0}-\frac{f_{1,0}\frac{\partial f_{2,0}}{\partial C_B}-f_{2,i}\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,i}}{\partial C_B}-\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,0}}{\partial C_A}}=0.2-\frac{(0.1760)x(-7.1200)-(-0.2120)(-4.2400)}{(-4.2400)x(-7.1200)-(-6.2400)x(-3.1200)}=0.4007$$

$$C_{B,1}=C_{B,0}-\frac{f_{2,0}\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_A}-f_{1,0}\frac{\partial f_{2,0}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,0}}{\partial C_B}-\frac{\partial f_{1,0}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,0}}{\partial C_A}}=0.1-\frac{(-0.212)x(-4.24)-(0.176)x(-3.12)}{(-4.24)x(-7.12)-(-6.24)x(-3.12)}=-0.0351$$

คำนวณรอบที่ 2 จากการคำนวณรอบแรกพบว่า $C_{A,1}$ เท่ากับ 0.4007 mol/L และ $C_{B,1}$ เท่ากับ -0.0351 mol/L ตามลำดับ

$$f_{1,1}(C_A,C_B)=1-30C_{A,1}C_{B,1}-6C_{A,1}^2C_{B,1}-C_{A,1}$$
$$f_{1,1}(C_A,C_B)=1-30\times0.4007\times(-0.0351)-6\times(0.4007)^2\times(-0.0351)-0.4007=1.0547$$

$$f_{2,1}(C_A,C_B)=0.5-30C_{A,1}C_{B,1}-3C_{A,1}^2C_{B,1}-C_{B,1}$$

$$f_{2,1}(C_A,C_B)=0.5-30x0.4007x(-0.0351)-3x0.4007^2x(-0.0351)-(-0.0351)=0.9737$$

$$\frac{\partial f_{1,1}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,1}+0.2C_{A,1}C_{B,1}\right)-1=-60(0.5\times(-0.0351)+0.2\times0.4007\times(-0.0351))-1=0.2209$$

$$\frac{\partial f_{1,1}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,1}+0.1C_{A,1}^2\right)=-60\left(0.5\times0.4007+0.1\times(0.4007)^2\right)=-12.9860$$

$$\frac{\partial f_{2,1}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,1}+0.1C_{A,1}C_{B,1}\right)=-60\left(0.5\times(-0.0351)+0.1\times0.4007\times(-0.0351)\right)=1.1366$$

$$\frac{\partial f_{2,1}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,1}+0.05C_{A,1}^2\right)-1=-60\left(0.5\times0.4007+0.05\times(0.4007)^2\right)-1=-13.5042$$

$$C_{A,1}=C_{A,1}-\frac{f_{1,1}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_B}-f_{2,1}\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_B}-\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_A}}=0.2-\frac{(1.0547)x(1.1366)-(0.9737)(0.2209)}{(0.2209)x(-13.5042)-(-12.9860)x(1.1366)}=1.6285$$

$$C_{B,1}=C_{B,1}-\frac{f_{2,1}\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_A}-f_{1,1}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_B}-\frac{\partial f_{1,1}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,1}}{\partial C_A}}=0.1-\frac{(0.9737)x(0.2209)-(1.0547)x(1.1366)}{(0.2209)x(-13.5042)-(-12.9860)x(1.1366)}=0.0485$$

คำนวณรอบที่ 3 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,2}=1.6285$ mol/L และ $C_{B,2}=0.0485$ mol/L

$$f_{1,2}(C_A,C_B)=1-30C_{A,2}C_{B,2}-6C_{A,2}^2C_{B,2}-C_{A,2}$$

$$f_{1,2}(C_A,C_B)=1-30x1.6285x(0.0485)-6x(1.6285)^2x(0.0485)-1.6285=-3.7669$$

$$f_{2,2}(C_A,C_B)=0.5-30C_{A,2}C_{B,2}-3C_{A,2}^2C_{B,2}-C_{B,2}$$

$$f_{2,2}(C_A,C_B)=0.5-30x1.6285x(0.0485)-3x1.6285^2x(0.04685)-(0.0485)=-2.3013$$

$$\frac{\partial f_{1,2}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,2}+0.2C_{A,2}C_{B,2}\right)-1=-60(0.5\times(0.0485)+0.2\times1.6285\times(0.0485))-1=-3.4006$$

$$\frac{\partial f_{1,2}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,2}+0.1C_{A,2}^2\right)=-60\left(0.5\times1.6285+0.1\times(1.6285)^2\right)=-64.7670$$

$$\frac{\partial f_{2,2}(C_A,C_B)}{\partial C_A}=-60\left(0.5C_{B,2}+0.1C_{A,2}C_{B,2}\right)=-60\left(0.5\times(0.0485)+0.1\times1.6285\times(0.0485)\right)=-1.9272$$

$$\frac{\partial f_{2,2}(C_A,C_B)}{\partial C_B}=-60\left(0.5C_{A,2}+0.05C_{A,2}^2\right)-1=-60\left(0.5\times1.6285+0.05\times(1.6285)^2\right)-1=-57.8110$$

$$C_{A,2}=C_{A,2}-\frac{f_{1,2}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_B}-f_{2,2}\frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_B}-\frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_A}}=0.2-\frac{(-3.7669)x(-57.8110)-(-2.3013)(-3.4006)}{(-3.4006)x(-57.8110)-(-64.7670)x(-1.9272)}=-1.2964$$

$$C_{B,2} = C_{B,2} - \frac{f_{2,2}\frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_A} - f_{1,2}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_A}}{\frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_A}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_B} - \frac{\partial f_{1,2}}{\partial C_B}\frac{\partial f_{2,2}}{\partial C_A}} = 0.1 - \frac{(-2.3013)x(-3.4006)-(-3.7669)x(-57.8110)}{(-3.4006)x(-57.8110)-(-64.7670)x(-1.9272)} = 0.0406$$

ตารางที่ E4.13-1 ผลการคำนวณตามระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสัน

รอบ	$C_{A,i}$	$C_{B,i}$	$f(C_{A,i})$	$f(C_{B,i})$	$f'_1(C_{A,i})$	$f'_1(C_{B,i})$	$f'_2(C_{A,i})$	$f'_2(C_{B,i})$
0	0.2000	0.1000	0.1760	-0.2120	-4.2400	-6.2400	-3.1200	-7.1200
1	0.4007	-0.0351	1.0547	0.9737	0.2209	-12.9860	1.1366	-13.5042
2	1.6285	0.0485	-3.7669	-2.3013	-3.4006	-64.7670	-1.9272	-57.8110
3	-1.2964	0.0406	3.4650	1.8325	-1.5859	28.8082	-0.9014	32.8502
4	3.1711	0.0489	-9.7697	-5.6729	-4.3261	-155.4710	-2.3961	-126.3026
5	-3.7849	0.0424	5.9539	3.4472	-0.3468	27.5943	-0.3089	69.5705

จากตารางที่ E4.13-1 พบว่าเมื่อใช้ระเบียบวิธีของนิวตัน-ราฟสันพบว่าไม่สามารถหาคำตอบของระบบสมการไม่เชิงเส้นได้

4.10.3 ระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้และระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

ระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้และระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดลสามารถประยุกต์ใช้ในการแก้ปัญหาระบบสมการไม่เชิงเส้นได้เช่นกัน โดยมีหลักการเช่นเดียวกับที่ได้กล่าวในหัวข้อ 4.7

ตัวอย่างที่ 4.14 ปฏิกิริยาผลิต A + B ⟶ C พบว่ามีอัตราการเกิด C เท่ากับ $r_C = 0.5C_AC_B$ mol/L-min แต่เกิดปฏิกิริยาข้างเคียงคือ 2A +B ⟶ D พบว่ามีอัตราการเกิด D เท่ากับ $r_D = 0.05C_A^2C_B$ mol/L-min เมื่อดำเนินปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวน พบว่า ความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และสาร B ที่เวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็นดังนี้

$$C_A = C_{A0} - \left(0.5C_AC_B + 0.1C_A^2C_B\right)\tau$$

$$C_B = C_{B0} - \left(0.5C_AC_B + 0.05C_A^2C_B\right)\tau$$

เมื่อ C_{A0} และ C_{B0} คือความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/Lตามลำดับ C_A และ C_B คือความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B mol/L ตามลำดับ τ คือเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ (min) จงหาว่าความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับเท่าไร ถ้าความเข้มข้นที่ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A และ B มีค่าเท่ากับ 1.0 และ 0.5 mol/L และเวลาที่สารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ 60 min ด้วยระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้และระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

วิธีทำ

เมื่อแทนค่าคงที่ต่างจะได้เป็น

$$C_A = 1-60\left(0.5C_AC_B+0.1C_A^2C_B\right) = 1-30C_AC_B-6C_A^2C_B \qquad \text{(E4.14-1)}$$

$$C_B = 0.5-60\left(0.5C_AC_B+0.05C_A^2C_B\right) = 0.5-30C_AC_B-3C_A^2C_B \qquad \text{(E4.14-2)}$$

ระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

ปรับสมการให้อยู่ในรูประเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

$$C_{A,i+1} = 1-30C_{A,i}C_{B,i}-6C_{A,i}^2C_{B,i}$$

$$C_{B,i+1} = 0.5-30C_{A,i+1}C_{B,i}-3C_{A,i+1}^2C_{B,i}$$

การคำนวณรอบที่ 1 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,0}$ เป็น 0.2 mol/L และ $C_{B,0}$ เป็น 0.1 mol/L

$$C_{A,1} = 1-30C_{A,0}C_{B,0}-6C_{A,0}^2C_{B,0} = 1-30(0.2)(0.1)-6(0.3)^2(0.1) = 0.3760$$

$$C_{B,1} = 0.5-30C_{A,1}C_{B,0}-3C_{A,1}^2C_{B,0} = 0.5-30(0.376)(0.1)-3(0.376)^2(0.1) = -0.6704$$

การคำนวณรอบที่ 2 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,1}$ เป็น 0.3760 mol/L และ $C_{B,1}$ เป็น -0.6704 mol/L

$$C_{A,2} = 1-30C_{A,1}C_{B,1}-6C_{A,1}^2C_{B,1} = 1-30(0.376)(-0.670)-6(0.376)^2(-0.670) = 9.1309$$

$$C_{B,2} = 0.5-30C_{A,2}C_{B,1}-3C_{A,2}^2C_{B,1} = 0.5-30(9.1309)(-0.6704)-3(9.1309)^2(-0.6704) = 351.8300$$

การคำนวณรอบที่ 3 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,2}$ เป็น 9.1309 mol/L และ $C_{B,2}$ เป็น 351.8300 mol/L

$$C_{A,3} = 1-30C_{A,2}C_{B,2}-6C_{A,2}^2C_{B,2} = 1-30(9.1309)(351.8300)-6(9.1309)^2(351.8300) = -272,376.0349$$

$$C_{B,3} = 0.5-30C_{A,3}C_{B,2}-3C_{A,3}^2C_{B,2} = 0.5-30(-272,376.0349)(351.8300)-3(-272,376.0349)^2(351.83$$

$$= -7.8303\times10^{13}$$

จากระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้พบว่าค่าคำนวณได้ของ $C_{A,2}$ และ $C_{B,2}$ ไม่ลู่เข้าหาคำตอบ แสดงว่าสมการที่ใช้ในการคำนวณระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ไม่เหมาะสม

ระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

ปรับสมการให้อยู่ในรูประเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

$$C_{A,i+1} = 1-30C_{A,i}C_{B,i}-6C_{A,i}^2C_{B,i}$$

$$C_{B,i+1} = 0.5-30C_{A,i}C_{B,i}-3C_{A,i}^2C_{B,i}$$

การคำนวณรอบที่ 1 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,0}$ เป็น 0.2 mol/L และ $C_{B,0}$ เป็น 0.1 mol/L

$$C_{A,1} = 1-30C_{A,0}C_{B,0}-6C_{A,0}^2C_{B,0} = 1-30(0.2)(0.1)-6(0.2)^2(0.1) = 0.3760$$

$$C_{B,1} = 0.5-30C_{A,0}C_{B,0}-3C_{A,0}^2C_{B,0} = 1-30(0.2)(0.1)-3(0.2)^2(0.1) = 0.3880$$

การคำนวณรอบที่ 2 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,1}$ เป็น 0.3760 mol/L และ $C_{B,1}$ เป็น 0.3880 mol/L

$$C_{A,2} = 1-30C_{A,1}C_{B,1}-6C_{A,1}^2C_{B,1} = 1-30(0.3760)(0.3880)-6(0.3760)^2(0.3880) = -3.7058$$

$$C_{B,2} = 0.5-30C_{A,1}C_{B,1}-3C_{A,1}^2C_{B,1} = 1-30(0.3760)(0.3880)-3(0.3760)^2(0.3880) = -3.5412$$

การคำนวณรอบที่ 3 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,2}$ เป็น -3.7058 mol/L และ $C_{B,2}$ เป็น -3.5412 mol/L

$$C_{A,3} = 1 - 30C_{A,2}C_{B,2} - 6C_{A,2}^2 C_{B,2} = 1 - 30(-3.7058)(-3.5412) - 6(-3.7058)^2(-3.5412) = -100.9045$$

$$C_{B,3} = 0.5 - 30C_{A,2}C_{B,2} - 3C_{A,2}^2 C_{B,2} = 1 - 30(-3.7058)(-3.5412) - 3(-3.7058)^2(-3.5412) = -246.7951$$

จากระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้พบว่าค่าคำนวณได้ของ $C_{A,2}$ และ $C_{B,2}$ ไม่ลู่เข้าหาคำตอบ แสดงว่าสมการที่ใช้ในการคำนวณระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ไม่เหมาะสม ดังนั้นจึงปรับสมการ (E4.14-1) และ (E4.14-2) ได้เป็นสมการ (E4.14-3) และ (E4.14-4)

$C_A = 1 - 30C_A C_B - 6C_A^2 C_B$ เป็น $C_A = \sqrt{\dfrac{1 - C_A - 30C_A C_B}{6C_B}}$

(E4.14-3)

$C_B = 0.5 - 30C_A C_B - 3C_A^2 C_B$ เป็น $C_B = \dfrac{0.5}{1 + 30C_A + 3C_A^2}$ (E4.14-4)

ระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

เขียนสมการ(E4.14-3) และ (E4.14-4) ให้อยู่ในรูปประเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

$$C_{A,i+1} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,i} - 30C_{A,i}C_{B,i}}{6C_{B,i}}}$$

$$C_{B,i+1} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,i+1} + 3C_{A,i+1}^2}$$

การคำนวณรอบที่ 1 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,0}$ เป็น 0.2 mol/L และ $C_{B,0}$ เป็น 0.1 mol/L

$$C_{A,1} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,0} - 30C_{A,0}C_{B,0}}{6C_{B,0}}} = \sqrt{\frac{1 - (0.2) - 30(0.2)(0.1)}{6(0.1)}} = 0.0577$$

$C_{A,1}$ เป็น 0.0577 mol/L และ $C_{B,0}$ เป็น 0.1 mol/L

$$C_{B,1} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,1} + 3C_{A,1}^2} = \frac{0.5}{1 + 30(0.0577) + 3(0.0577)^2} = 0.1823$$

การคำนวณรอบที่ 2 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,1}$ เป็น 0.0577 mol/L และ $C_{B,1}$ เป็น 0.1823 mol/L

$$C_{A,2} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,1} - 30C_{A,1}C_{B,1}}{6C_{B,1}}} = \sqrt{\frac{1 - (0.0577) - 30(0.0577)(0.1823)}{6(0.1823)}} = 0.1380$$

$C_{A,2}$ เป็น 0.1380 mol/L และ $C_{B,1}$ เป็น 0.1823 mol/L

$$C_{B,2} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,2} + 3C_{A,2}^2} = \frac{0.5}{1 + 30(0.1380) + 3(0.1380)^2} = 0.0962$$

การคำนวณรอบที่ 3 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,2}$ เป็น 0.1380 mol/L และ $C_{B,2}$ เป็น 0.0962 mol/L

$$C_{A,3} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,2} - 30C_{A,2}C_{B,2}}{6C_{B,2}}} = \sqrt{\frac{1 - (0.1380) - 30(0.1380)(0.0962)}{6(0.0962)}} = 0.0862$$

$$C_{B,3} = \frac{0.5}{1+30C_{A,3}+3C_{A,3}^2} = \frac{0.5}{1+30(0.0862)+3(0.0862)^2} = 0.1385$$

ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบจาโคบี้ ดังแสดงในตารางที่ 4.14-1 จากตารางที่ E4.14-1 พบว่าความเข้มข้นของสาร A และสาร B ไม่มีการเปลี่ยนแปลงเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 15 ซึ่งพบว่าความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A เป็น 0.1028 mol/L และความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร B เป็น 0.1215 mol/L

ตารางที่ 4.14-1 ผลการคำนวณระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบจาโคบี้

รอบ	C_A	C_B
0	0.2000	0.1000
1	0.0577	0.1823
2	0.1380	0.0962
3	0.0862	0.1385
4	0.1132	0.1127
5	0.0973	0.1267
6	0.1061	0.1186
7	0.1010	0.1231
8	0.1039	0.1205
9	0.1023	0.1220
10	0.1032	0.1212
11	0.1027	0.1216
12	0.1029	0.1214
13	0.1028	0.1215
14	0.1029	0.1214
15	0.1028	0.1215

ระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

เขียนสมการ(E4.14-3) และ (E4.14-4) ให้อยู่ในรูประเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

$$C_{A,i+1} = \sqrt{\frac{1-C_{A,i}-30C_{A,i}C_{B,i}}{6C_{B,i}}}$$

$$C_{B,i+1} = \frac{0.5}{1+30C_{A,i}+3C_{A,i}^2}$$

การคำนวณรอบที่ 1 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,0}$ เป็น 0.2 mol/L และ $C_{B,0}$ เป็น 0.1 mol/L

$$C_{A,1} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,0} - 30C_{A,0}C_{B,0}}{6C_{B,0}}} = \sqrt{\frac{1-(0.2)-30(0.2)(0.1)}{6(0.1)}} = 0.0577$$

$$C_{B,1} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,0} + 3C_{A,0}^2} = \frac{0.5}{1+30(0.2)+3(0.2)} = 0.0702$$

การคำนวณรอบที่ 2 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,1}$ เป็น 0.577 mol/L และ $C_{B,1}$ เป็น 0.0702 mol/L

$$C_{A,2} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,1} - 30C_{A,1}C_{B,1}}{6C_{B,1}}} = \sqrt{\frac{1-(0.0577)-30(0.0577)(0.0702)}{6(0.0702)}} = 0.0980$$

$$C_{B,2} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,1} + 3C_{A,1}^2} = \frac{0.5}{1+30(0.0577)+3(0.0577)} = 0.1823$$

การคำนวณรอบที่ 3 ถ้าเริ่มต้นให้ $C_{A,2}$ เป็น 0.0980 mol/L และ $C_{B,2}$ เป็น 0.1823 mol/L

$$C_{A,3} = \sqrt{\frac{1 - C_{A,2} - 30C_{A,2}C_{B,2}}{6C_{B,2}}} = \sqrt{\frac{1-(0.0980)-30(0.0980)(0.1823)}{6(0.1823)}} = 0.1054$$

$$C_{B,3} = \frac{0.5}{1 + 30C_{A,2} + 3C_{A,2}^2} = \frac{0.5}{1+30(0.0980)+3(0.0980)} = 0.1260$$

ผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล ดังแสดงในตารางที่ 4.14-2 จากตารางที่ E4.14-2 พบว่าความเข้มข้นของสาร A และสาร B ไม่มีการเปลี่ยนแปลงเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 10 ซึ่งพบว่าความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร A เป็น 0.1028 mol/L และความเข้มข้นที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ของสาร B เป็น 0.1215 mol/L

ตารางที่ 4.14-2 ผลการคำนวณระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

รอบ	C_A	C_B
0	0.2000	0.1000
1	0.0577	0.0702
2	0.0980	0.1823
3	0.1054	0.1260
4	0.1021	0.1191
5	0.1029	0.1222
6	0.1029	0.1214
7	0.1028	0.1214
8	0.1028	0.1215
9	0.1028	0.1214
10	0.1028	0.1215

4.10 แบบฝึกหัด

HM4.1 ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและปริมาตรของก๊าซ เป็นดังสมการ (HM4.1-1) และได้ผลการทดลองความสัมพันพธ์ระหว่างความดันกับปริมาตรของก๊าซดังตารางที่ HM4.1 เมื่อทำการทดลองที่อุณหภูมิ 303 K

$$\frac{PV}{RT} = A + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} \qquad \text{(HM4.1-1)}$$

เมื่อ P คือความดันของก๊าซ (atm) V คือปริมาตรของก๊าซ (L) T คืออุณหภูมิ (K) R เป็นค่าคงที่ของก๊าซ และมีค่าเท่ากับ 0.082 L-atm/gmol-K เมื่อ A, B และ C เป็นค่าคงที่ จงหาค่าความดันของก๊าซ เมื่อปริมาตรมีค่าเท่ากับ 13.50 L ด้วยการแก้ระบบสมการด้วยการแยก LU

ตารางที่ HM4.1 ผลการทดลองความสัมพันธ์ระหว่างความดันและปริมาตรของก๊าซที่อุณหภูมิ 303 K

P (atm)	0.985	1.108	1.363
V (L)	25.000	22.2	18.000

HM4.2 คาเฟอีน (caffeine) เป็นสารที่อยู่ในเครื่องดื่ม ดังนั้นในการผลิตกาแฟที่ปราศจากคาเฟอีนสามารถทำได้โดยการใช้ตัวทำละลาย t-butyl methyl ether เป็นสารสกัด พบว่าค่าคงที่ในการสกัด ($K_{TBME/W}$) กับ 2 ถ้ากระบวนการสกัดคาเฟอีนที่ละลายในน้ำด้วยตัวทำละลาย TBME โดยป้อนแบบไหลสวนทางกัน เมื่อสายป้อนประกอบด้วยกาเฟอีนที่ละลายในน้ำ 60 g/L ที่อัตราการป้อน 1000 kg/min ในขณะที่สายสกัดป้อนตัวทำละลาย TBME บริสุทธิ์ที่อัตรากการป้อน 2000 kg/min ถ้าถังสกัดมีจำนวน 10 ถัง จงหาความเข้มข้นของคาเฟอีนที่เหลือในน้ำและความเข้มข้นของคาเฟอีนในชั้นตัวทำลลาย TBME

HM4.3 การผลิตสาร C ในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวน พบว่ามีปฏิกิริยาเกิดขึ้นดังนี้

$A + B \longrightarrow C \qquad -r_{A,1} = 1C_A$

$A + 2B + 3C \longrightarrow D \qquad -r_{C,2} = 3C_C$

$2B + C \longrightarrow D \qquad -r_{B,3} = 2C_B$

สมดุลมวลของสาร A : $V_{CSTR}/\upsilon_0 = (C_{A0} - C_A)/(C_A + C_C)$

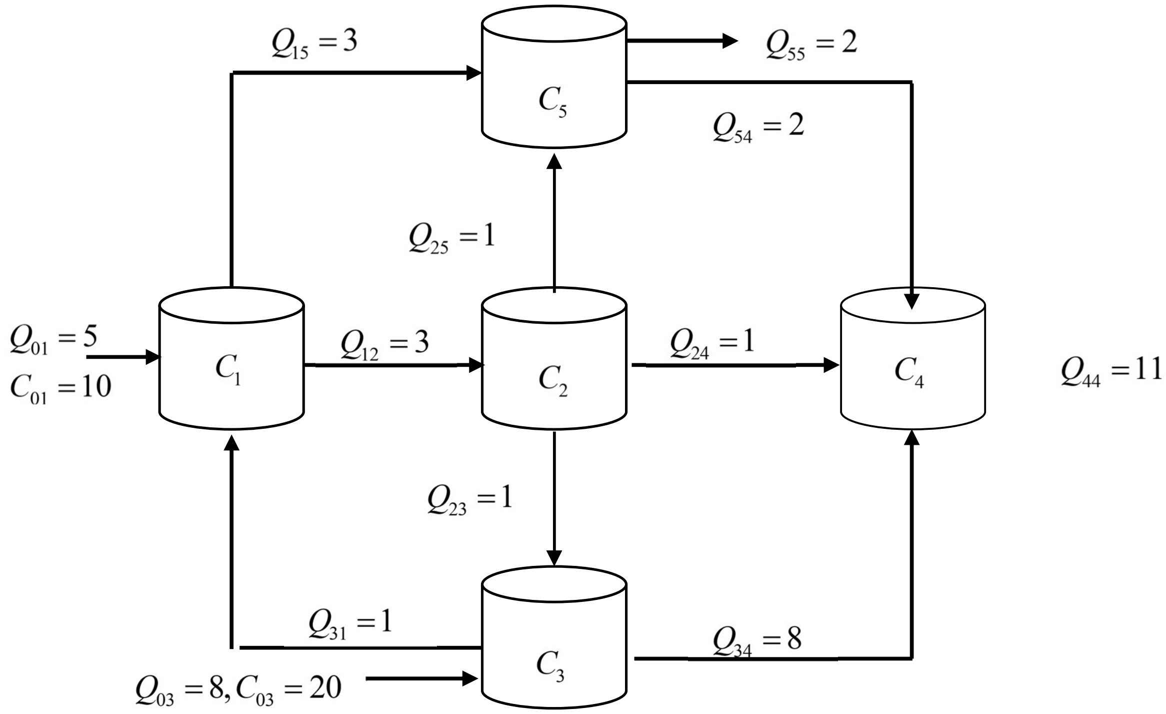
สมดุลมวลของสาร B : $V_{CSTR}/\upsilon_0 = (C_{B0} - C_B)/(C_A + 2C_C + 2C_B)$

สมดุลมวลของสาร C : $V_{CSTR}/\upsilon_0 = (C_{C0} - C_C)/(-C_A + 3C_C + 1C_B)$

เมื่อ V_{CSTR} คือปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวน (m^3) υ_0 คืออัตราการไหลเชิงปริมาตร (m^3/min) C_{A0}, C_{B0}, C_{C0} ความเข้มข้นของสาร A B C ที่ตำแน่งทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (mol/m^3) ตามลำดับ และ C_A, C_B, C_C ความเข้มข้นของสาร A B C ที่ตำแหน่งทางออกเครื่องปฏิกรณ์ (mol/m^3) ตามลำดับ ถ้าปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์มีขนาดเท่ากับ 10 m^3 อัตราการไหลเชิงปริมาตรเท่ากับ 10 m^3/min ความเข้มข้นของสาร A B C ที่ทางขาเข้า

เครื่องปฏิกรณ์เท่ากับ 10 20 และ 0 mol/m^3 ตามลำดับ จงหาความเข้มข้นของสาร A B C และ D ที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์

HM4.4 จงหาความเข้มข้นของน้ำตาลในแต่ละถังผสมดังแสดงในรูปที่ HM4.4-1 เมื่อ Q คืออัตราการไหลเชิงปริมาตรของสารละลายน้ำตาล (L/min) และ x คือความเข้มข้นของน้ำตาล (g/L) F_{in} คืออัตราการไหลเชิงมวลของน้ำตาล (g/min) และตัวเลขแสดงทิศทางการไหลของสาร เช่น 12 หมายถึงสารละลายน้ำตาลไหลจากถังที่ 1 ไปยังถังที่สอง เป็นต้น



รูปที่ HM4.4-1 ภาพประกอบปัญหา HM4.4

ที่มา: Chapra (2010)

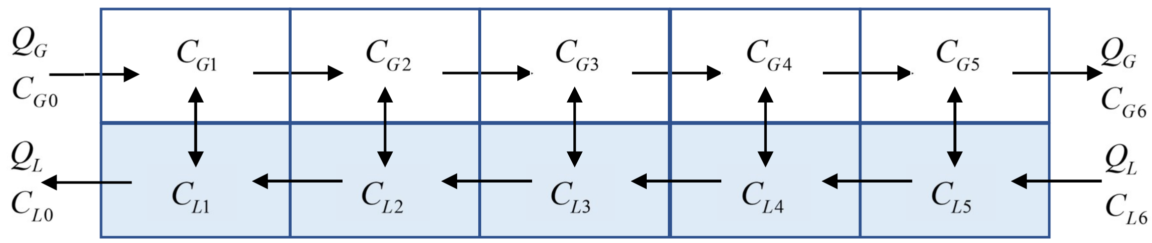
HM4.5 ในปฏิกิริยาการละลายของก๊าซ A จากเฟสก๊าซไปยังเฟสของเหลวสามารถแสดงการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสก๊าซและเฟสของเหลวในหน่วยดูดซับจำนวน 5 หน่วย ดังรูปที่ HM4.5-1

เมื่อพิจารณาหน่วยดูดซับที่ 1 สามารถเขียนสมดุลมวลได้ดังนี้

สมดุลมวลในเฟสก๊าซ $Q_G C_{G0} - Q_G C_{G1} + D(C_{L1} - C_{G1}) = 0$

สมดุลมวลในเฟสของเหลว $Q_L C_{L2} - Q_L C_{L1} + D(C_{G1} - C_{L1}) = 0$

เมื่อ Q อัตราการไหลเชิงปริมาตร (m^3/h) C_G คือความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสก๊าซ (g/m^3) C_L คือความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสของเหลว (g/m^3) D คืออัตราการถ่ายเทมวล (m^3/h)



รูปที่ HM4.5-1 ภาพประกอบปัญหา HM4.4

ที่มา: Chapra (2010)

จงหาความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสก๊าซและในเฟสของเหลวในแต่ละหน่วยดูดซับ ถ้าความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสก๊าซที่เข้าหน่วยดูดซับที่ 1 เท่ากับ 100 g/m^3 และความเข้มข้นของก๊าซ A ในเฟสของเหลวที่เข้าหน่วยดูดซับที่ 5 เท่ากับ 0 g/m^3 ถ้าอัตราการไหลเชิงปริมาตรของก๊าซและของเหลวเป็น 2 และ 1 m^3/h ตามลำดับ และอัตราการถ่ายเทมวลเท่ากับ 0.8 m^3/h

HM4.6 ในการกระจายความร้อน 2 มิติของแผ่นเหล็กเป็นไปตามสมการลาปลาซดังสมการ (HM4.6-1)

$$0=\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \qquad \text{(HM4.6-1)}$$

การกระจายอุณหภูมิบนแผ่นเหล็กพบว่ามีการกระจายอุณหภูมิดังรูปที่ HM4.6-1 จากสมการ (HM4.6-1) สามารถเขียนได้เป็นสมการ (HM4.6-2)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta y^2}$$

$$\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta y^2}=0$$

เมื่อ $\Delta x=\Delta y$ ดังนั้น

$$T_{i+1,j}+T_{i-1,j}+T_{i,j+1}+T_{i,j-1}-4T_{i,j}=0 \qquad \text{(HM4.6-2)}$$

พิจารณาจุด T_{11}

$T_{21}+T_{01}+T_{12}+T_{10}-4T_{11}=0$ เมื่อ $T_{01}=100\ °C,\ T_{10}=75\ °C$

ดังนั้น $T_{21}+100+T_{12}+75-4T_{11}=0$ หรือ $4T_{11}-T_{12}-T_{21}=175$

พิจารณาจุด T_{21}

$T_{31}+T_{11}+T_{22}+T_{20}-4T_{21}=0$ เมื่อ $T_{20}=75°C,\ T_{31}=0°C$

ดังนั้น $0+T_{11}+T_{22}+75-4T_{21}=0$ หรือ $4T_{21}-T_{11}-T_{22}=75$

พิจารณาจุด T_{12}

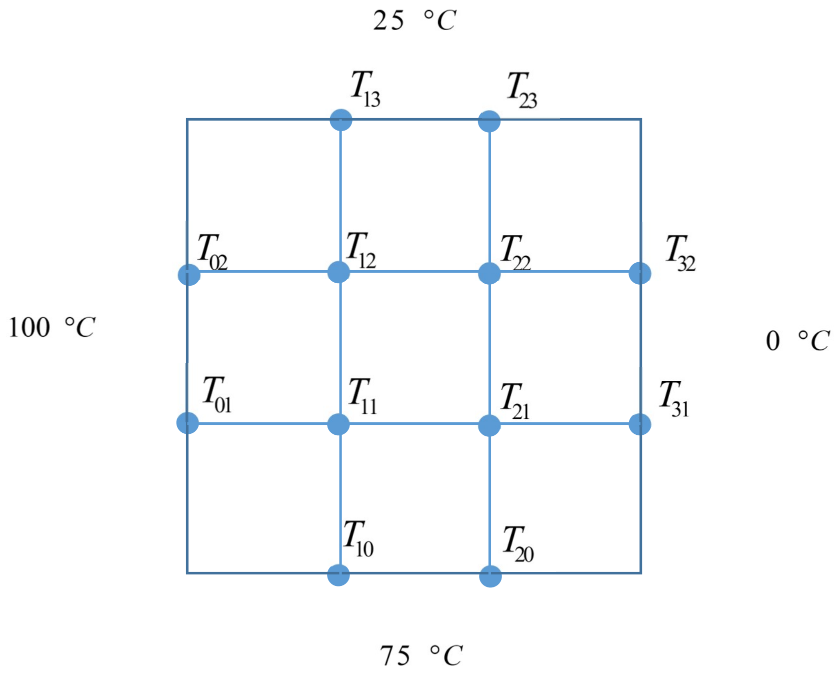
$T_{22}+T_{02}+T_{11}+T_{13}-4T_{12}=0$ เมื่อ $T_{02}=100\ °C,\ T_{13}=25\ °C$

ดังนั้น $T_{22}+100+T_{11}+25-4T_{12}=0$ หรือ $4T_{12}-T_{11}-T_{22}=125$

พิจารณาจุด T_{22}

$T_{32}+T_{12}+T_{21}+T_{23}-4T_{22}=0$ เมื่อ $T_{23}=25°C,\ T_{32}=0°C$

ดังนั้น $0+T_{12}+T_{21}+25-4T_{22}=0$ หรือ $4T_{22}-T_{12}-T_{21}=25$



รูปที่ HM4.6-1 ภาพประกอบปัญหา HM4.6

ที่มา: Chapra (2010)

จงหาอุณหภูมิที่จุด T11 T12 T21 T22ระเบียบวิธีการกระทำซ้ำแบบเกาส์-ไซเดล

4.10 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. Ward Cheney and David Kincaid, Numerical Mathematics and Computing (Sixth edition), Thomson Higher Education, 2008

4. Kenneth A. Solen and John N. Harb, Introduction to Chemical Engineering: Tools for Today and Tomorrow (Fifth edition), John Wiley & Sons Inc, 2010

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 7

หัวข้อการสอน

บทที่ 5 การหาสมการการถดถอยเชิงเส้น

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นและการประยุกต์ใช้การถดถอยเชิงเส้นกับการแก้ปัญหา
2. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นทางสถิติ
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาการถดถอยกำลังสองเชิงเส้น
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการเปลี่ยนสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้น
5. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาการถดถอยแบบพหุนาม
6. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาการถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณ
7. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาการถดถอยไม่เชิงเส้น

เนื้อหา

1. บทนำ
2. ความรู้เบื้องต้นทางสถิติ
3. การถดถอยกำลังสองเชิงเส้น
4. การเปลี่ยนสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้น
5. การถดถอยแบบพหุนาม
6. การถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณ
7. การถดถอยไม่เชิงเส้น

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 5 การถดถอยเชิงเส้น

5.1 บทนำ

การถดถอยเชิงเส้น (Linear Regression) เป็นการวิเคราะห์ข้อมูลที่ได้จากการทำการทดลอง เพื่อสร้างเป็นสมการอธิบายผลการทดลอง สำหรับรูปแบบสมการสามารถเขียนได้หลายรูปแบบ เช่น สมการโพลินอเมียน สมการเอ็กโปแนนเซีล เป็นต้น การวิเคราะห์การถดถอยเป็นวิธีการทางสถิติที่ใช้ศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรอิสระ (Independent Variable) กับตัวแปรตาม (Dependent Variable) จะเป็นการศึกษาความสัมพันธ์เชิงเส้นตรง (Linearity) ถ้าศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรอิสระหนึ่งตัวกับตัวแปรตามหนึ่งตัว เรียกว่า การวิเคราะห์ถดถอยเชิงเส้นเชิงเดี่ยวหรือการวิเคราะห์ถดถอยเชิงเส้นอย่างง่าย (Simple Linear Regression Analysis) ถ้าตัวแปรอิสระมีมากกว่าหนึ่งตัวกับตัวแปรตามหนึ่งตัว เรียกว่า การวิเคราะห์การถดถอยเชิงเส้นพหุคูณ (Multiple Linear Regression)

5.2 ความรู้เบื้องต้นทางสถิติ

5.2.1 ค่าเฉลี่ยเลขคณิต

ค่าเฉลี่ยเลขคณิต (Arithmetic Mean, $\bar{y}$) หมายถึง การหาผลรวมของข้อมูลทั้งหมดหารด้วยจำนวนข้อมูลทั้งหมด ดังสมการ (5.1)

$$\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n} \tag{5.1}$$

5.2.2 มัธยฐาน

มัธยฐาน (Median) หมายถึง ค่ากึ่งกลางของข้อมูลชุดนั้น หรือค่าที่อยู่ในตำแหน่งกึ่งกลางของข้อมูลชุดนั้น เมื่อได้จัดเรียงค่าของข้อมูลจากน้อยที่สุดไปหามากที่สุด ค่ากึ่งกลางซึ่งหาได้จากสมการ (5.2) ซึ่งค่ากึ่งกลางเป็นค่าที่แสดงว่ามีข้อมูลที่มากกว่าและน้อยกว่านี้อยู่ 50 เปอร์เซ็นต์ ซึ่งเทียบกับค่าเฉลี่ยเลขคณิต

$$position = \frac{n+1}{2} \tag{5.2}$$

5.2.3 ฐานนิยม

ฐานนิยม (Mode) หมายถึง ค่าของข้อมูลที่มีจำนวนซ้ำกันมากที่สุด หรือข้อมูลที่มีความถี่สูงที่สุดในข้อมูลชุดนั้น ฐานนิยมยังเป็นค่าที่บงบอกถึงการกระจายตัวของข้อมูลด้วย

ตัวอย่าง 5.1 จากข้อมูบต่อไปนี้ 3, 2, 4, 5, 6, 4, 8, 4, 7, 10, 13 จงหาค่าเฉลี่ยเลขคณิต มัธยฐานและฐานนิยม

วิธีทำ

1. ค่าเฉลี่ยเลขคณิต สามารถหาได้จากสมการ (5.1)

$$\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n}$$

$$\sum y_i = (3+2+4+5+6+4+8+4+7+10+13) = 66$$

$$n = 11$$

ดังนั้น

$$\bar{y} = \frac{\sum y_i}{n} = \frac{66}{11} = 6$$

2. มัธยฐาน สามารถหาได้โดยการจัดเรียงข้อมูล แล้วหาตำแหน่งกึ่งกลางของข้อมูลจากสมการ (5.2)

2, 3, 4, 4, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 13

$n = 11$ ดังนั้น $position = \frac{11+1}{2} = 6$

มัธยฐานมีค่าเท่ากับ 5

3. ฐานนิยม สามารถหาได้จากจำนวนข้อมูลที่มีค่าเท่ากันและซ้ำกันมากที่สุด

จากข้อมูลที่เรียงจากน้อยสุดไปมากสูด 2, 3, 4, 4, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 13

ฐานนิยม เท่ากับ 4

5.2.4 ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Standard deviation, S_y) คือ ค่าที่ใช้วัดการกระจายที่ได้จากการหารากที่สองของค่าเฉลี่ยกำลังสองของผลต่างระหว่างค่าของข้อมูลแต่ละค่ากับค่าเฉลี่ยเลขคณิตของข้อมูลชุดนั้น ซึ่งสามารถหาได้จากสมการ (5.3)

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum \left(y_i - \bar{y}\right)^2}{n-1}} \tag{5.3}$$

5.2.5 ความแปรปรวน

ความแปรปรวน (variance, S_y^2) คือค่ากำลังสองของค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน ดังสมการ (5.4)

$$S_y^2 = \frac{\sum\left(y_i - \bar{y}\right)^2}{n-1} \tag{5.4}$$

สัมประสิทธิ์ของการแปรผัน (coefficient of variation, C.V.) เป็นอัตราส่วนระหว่างส่วนเบี่ยงเบนมาตรฐานกับค่าเฉลี่ยเลขคณิตของข้อมูลชุดนั้น ดังสมการ (5.5)

$$C.V. = \frac{S_y}{\bar{y}} x100\% \tag{5.5}$$

ตัวอย่าง 5.2 จากข้อมูบต่อไปนี้ 3, 2, 4, 5, 6, 4, 8, 4, 7, 10, 13 จงหาค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน ความแปรปรวนและสัมประสิทธิ์ของการแปรผัน

วิธีทำ

1. ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน สามารถหาได้จากสมการ (5.3)

$$\sum\left(y_i - \bar{y}\right)^2 = 108 \text{ และ } n = 11$$

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum\left(y_i - \bar{y}\right)^2}{n-1}} = \sqrt{\frac{108}{10}} = 3.2863$$

2. ความแปรปรวน สามารถหาได้จากสมการ (5.4)

$$S_y^2 = \frac{\sum\left(y_i - \bar{y}\right)^2}{n-1} = \frac{108}{11-1} = \frac{108}{10} = 10.8$$

3. สัมประสิทธิ์ของการแปรผันสามารถหาได้จากสมการ (5.5)

$$C.V. = \frac{S_y}{\bar{y}} x100\%$$

$$C.V. = \frac{S_y}{\bar{y}} x100\% = \frac{3.2863}{6} x100 = 54.77\%$$

5.3 การถดถอยกำลังสองเชิงเส้น

การถดถอยกำลังสองเชิงเส้น (Linear Least-Squares Regression) จะเป็นการนำข้อมูลจากตัวแปรที่ทำการศึกษามาวิเคราะห์หาความสัมพันธ์ที่สามารถบอกแนวโน้มของความสัมพันธ์โดยใช้แผนภาพเส้นตรงแทนได้ และจะทำการหาเส้นตรงทีดี่ที่สุดเพื่อเป็นตัวแทนของรูปแบบความสัมพันธ์ของตัวแปรที่

ศึกษา เส้นตรงที่ดีที่สุดจะมีเพียงเส้นเดียวโดยถือหลักการว่าจะต้องมีผลรวมของระยะห่างกำลังสองจากเส้นกราฟถึงทุกๆจุดนั้น มีค่าน้อยที่สุด ซึ่งเรียกว่าวิธีกำลังสองน้อยที่สุด (Method of LeastSquares)

สมการเส้นตรงที่ใช้ในการทำนายดังสมการ (5.6)

$$y = a_0 + a_1 x + e \tag{5.6}$$

เมื่อ a_0 และ a_1 เป็นค่าสัมประสิทธิ์ที่แสดงถึงจุดตัดของกราฟและค่าความชัน ตามลำดับ ส่วน e เป็นความคลาดเคลื่อนจากค่าจริงของข้อมูล ซึ่งสามารถหาได้จากสมการ (5.7)

$$e = y - a_0 - a_1 x \tag{5.7}$$

ดังนั้นเพื่อหาความคลาดเคลื่อนจากความจริงของทุกข้อมูลสามารถหาผลรวมของสมการ (5.7) ได้เป็นสมการ (5.8)

$$\sum_{i=1}^{n} e_i = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) \tag{5.8}$$

จากสมการ (5.8) พบว่าบางค่าความคลาดเคลื่อนมีค่าเป็นลบ และ เป็นบวก ได้ ซึ่งสามารถทำให้ผลรวมของความคลาดเคลื่อนมีค่าเท่ากับ 0 ได้ ดังนั้นเพื่อป้องการปัญหาดังกล่าวจึงใส่เครื่องหมายค่าสมบูรณ์ ดังสมการ (5.9)

$$\sum_{i=1}^{n} |e_i| = \sum_{i=1}^{n} |y_i - a_0 - a_1 x_i| \tag{5.9}$$

ถ้าให้ S_r เป็นผลบวกของค่าความคลาดเคลื่อนยกกำลังสอง ดังสมการ (5.10)

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right)^2 \tag{5.10}$$

จากสมการ (5.10) เราสามารถหา a_0 และ a_1 ทีผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดได้จากสมการ (5.11) และ (5.12) สำหรับหาค่า a_0 และ a_1

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) = 0 \tag{5.11}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right) x_i = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2 \right) = 0 \tag{5.12}$$

จากสมการ (5.11) และ (5.12) สามารถจัดได้เป็น (5.13) และ (5.14) ตามลำดับ

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = \sum_{i=1}^{n} a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \tag{5.13}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = \sum_{i=1}^{n} a_0 x_i + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^2 = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \tag{5.14}$$

ซึ่งสามารถเขียนสมการ (5.13) และ (5.14) ให้อยู่ในรูปเมตริกดังสมการ (5.15)

$$\begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} y_i \\ \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \end{bmatrix} \tag{5.15}$$

ค่าสหสัมพันธ์ (correlation coefficient) เป็นค่าที่แสดงว่าสมการที่ใช้ในการทำนายมีความคลาดเคลื่อนจากข้มอูลมากหรือน้อย ซึ่งสามารถหาได้จากสมการ (5.16)

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \tag{5.16}$$

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right)^2$$

$$S_t = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \bar{y} \right)^2$$

โดยค่า $r^2 = 1$ แสดงว่าสมการที่ใช้ในการทำนายดีมาก

ตัวอย่าง 5.3 เมื่อทำการทดลองวัดความเร็วของน้ำมันในแนวแกน Z (v_z) กับระยะทาง (x) ได้ข้อมูลดังตารางที่ E5.1-1 จงประมาณความเร็วของน้ำมันในแนวแกน Z ที่ระยะทางเท่ากับ 1.0 mm

ตารางที่ E5.1-1 ผลการทดลองวัดความเร็วของน้ำมันในแนวแกน Z กับระยะทาง

x (m)	0.00	4×10^{-4}	8×10^{-4}	12×10^{-4}	16×10^{-4}
v_z (m/s)	8.04×10^{-2}	5.14×10^{-2}	2.89×10^{-2}	1.29×10^{-2}	3.21×10^{-3}

วิธีทำ

ใช้สมการเส้นตรงในการทำนาย เพื่อหาค่า a_0 และ a_1 ในสมการ (5.15) จำเป็นต้องหาค่าต่อไปนี้ $\sum_{i=1}^{n} y_i$ $\sum_{i=1}^{n} x_i$ $\sum_{i=1}^{n} y_i x_i$ และ $\sum_{i=1}^{n} x_i^2$ ซึ่งให้ผลการคำนวณดังตารางที่ ตารางที่ E5.1-2

ตารางที่ E5.1-2 ผลการคำนวณเพื่อหาค่าตัวแปร a_0 และ a_1

n	*x*	v_z	x^2	$v_z x$
1	0.00	8.04×10^{-2}	0.00E+00	6.46416E-03
2	4×10^{-4}	5.14×10^{-2}	1.60E-07	2.64196E-03
3	8×10^{-4}	2.89×10^{-2}	6.40E-07	8.35210E-04
4	12×10^{-4}	1.29×10^{-2}	1.44E-06	1.66410E-04

n	x	v_z	x^2	$v_z x$
5	$16\text{x}10^{-4}$	$3.21\text{x}10^{-3}$	2.56E-06	1.03041E-05
sum	$4.00\text{x}10^{-3}$	$1.7681\text{x}10^{-1}$	$4.80\text{x}10^{-6}$	$1.011804\text{x}10^{-2}$

เขียนตามรูปแบบสมการ (5.15) ดังสมการ (E5.1-1)

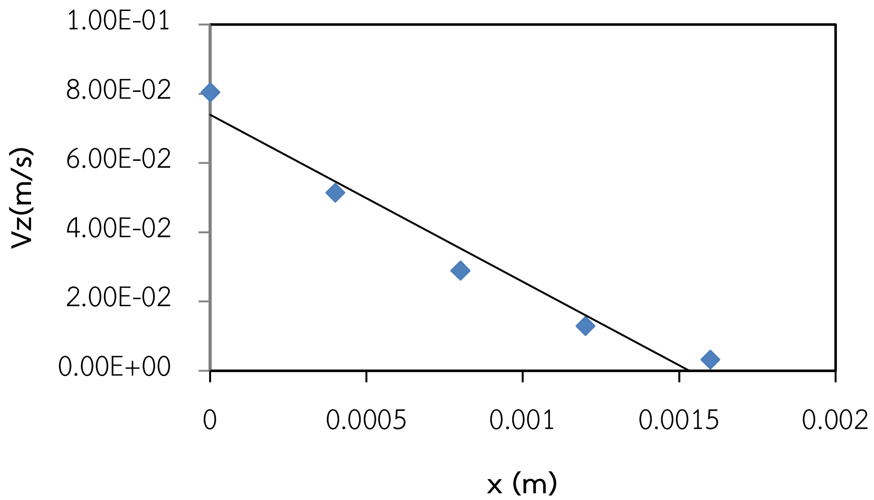
$$\begin{bmatrix} 5 & 4.00x10^{-3} \\ 4.00x10^{-3} & 4.80x10^{-6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.7681x10^{-1} \\ 1.011804x10^{-2} \end{bmatrix} \quad \text{(E5.1-1)}$$

ซึ่งจะได้ค่า a_0 และ a_1 ดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4.9529 \\ 6235.3725 \end{bmatrix}$$

ดังนั้นสมการสำหรับการทำนายคือ

$$v_z = -4.9529 + 6235.3725x$$



รูปที่ E5.1-1 ความสัมพันธ์ระหว่างค่าความเร็วของน้ำมันในแนวแกน z ที่ระยะทาง x ต่างๆ ระหว่างสมการที่ใช้ในการทำนายกับค่าที่ได้จากการทดลอง

5.4 การเปลี่ยนสมการไม่เชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้น

สมการที่ใช้ในวิชาต่าง ๆ มีทั้งสมการเชิงเส้นและสมการไม่เชิงเส้น สำหรับในหัวข้อ 5.3 เป็นการอธิบายการสร้างสมการสำหรับการทำนายค่าโดยอาศัยสมการเชิงเส้น ดังนั้นในหัวข้อนี้จะอธิบายการเปลี่ยนสมการไม่เชิงเส้นให้อยู่ในรูปของสมการเชิงเส้น

5.4.1 สมการเอกซ์โพเนเชียล

สมการเอกซ์โพเนเชียล (Exponential equation) สามารถเขียนสมการในรูปทั่วไปได้ตามสมการ (5.17)

$$y = a_0 e^{a_1 x} \tag{5.17}$$

สมการเอกซ์โพเนเชียลจัดเป็นสมการไม่เชิงเส้น ดังนั้นจำเป็นต้องเปลี่ยนสมการเอกซ์โพเนเชียลให้เป็นสมการเชิงเส้นโดยการใน ln ทั้งสองข้างของสมการดังสมการ (5.18)

$$\ln y = \ln\left(a_0 e^{a_1 x}\right) = \ln a_0 + a_1 x \ln(e) = a'_0 + a_1 x \tag{5.18}$$

5.4.2 สมการกำลัง

สมการกำลัง (Power equation) สามารถเขียนสมการในรูปทั่วไปได้ตามสมการ (5.19)

$$y = a_0 x^{a_1} \tag{5.19}$$

สมการกำลังจัดเป็นสมการไม่เชิงเส้น ดังนั้นจำเป็นต้องเปลี่ยนสมการสมการกำลังให้เป็นสมการเชิงเส้นโดยการใน log ทั้งสองข้างของสมการดังสมการ (5.20)

$$\log y = \log\left(a_0 x^{a_1}\right) = \log a_0 + a_1 \log x \tag{5.20}$$

5.4.3 สมการอัตราเพิ่มแล้วเข้าสู่จุดอิ่มตัว

สมการอัตราเพิ่มสู่จุดอิ่มตัว (Saturation growth equation) สามารถเขียนสมการในรูปทั่วไปได้ตามสมการ (5.21)

$$y = \frac{a_0 x}{a_1 + x} \tag{5.21}$$

สมการอัตราเพิ่มสู่จุดอิ่มตัวจัดเป็นสมการไม่เชิงเส้น ดังนั้นจำเป็นต้องเปลี่ยนสมการสมการอัตราเพิ่มสู่จุดอิ่มตัวให้เป็นสมการเชิงเส้นโดยการกลับเศษเป็นส่วนทั้งสองข้างของสมการดังสมการ (5.22)

$$\frac{1}{y} = \frac{a_1 + x}{a_0 x} = \frac{a_1}{a_0 x} + \frac{x}{a_0 x} = \frac{a_1}{a_0 x} + \frac{1}{a_0} \tag{5.22}$$

ตัวอย่าง 5.4 สมการของแอนดาร์ด (Andrade’s equation) เป็นสมการที่ใช้ในการทำนายความหนืดของสารที่อุณหภูมิต่างๆ ซึ่งสามารถเขียนเป็นสมการได้ดังนี้ $\eta = A\exp(B/T)$ เมื่อ η คือ ความหนืด (Dynamic viscosity, Ns/m^2) A และ B เป็นค่าคงที่ และ T คืออุณหภูมิ (K) ในขณะที่ Tate van & Gerpen ได้ปรับปรุงเป็นสมการแอนดาร์ดปรับปรุงให้มีค่าความถูกต้องมากขึ้น โดยใช้สมการ

$\ln\eta = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2}$ เมื่อ A B และ C เป็นค่าคงที่ จงหาค่าคงที่ของสมการของแอนดาร์ดและสมการแอนดาร์ดปรับปรุง จากผลการทดลองความหนืดของสารที่อุณหภูมิต่างๆในตารางที่ E5.4-1

ตารางที่ E5.4-1 ผลการทดลองความหนืดของสารที่อุณหภูมิต่างๆ

T (C)	0	5	10	20	30	40
η (mNs/m^2)	1.787	1.519	1.307	1.002	0.7975	0.6529

วิธีทำ

สมการของแอนดาร์ดคือ $\eta = A\exp(B/T)$ จัดรูปใหม่ได้เป็น $\ln\eta = \ln A + \frac{B}{T}$

ถ้าให้ y คือ $\ln\eta$ a_0 คือ $\ln A$ a_1 คือ B และ x คือ $\frac{1}{T}$ จะเห็นว่าเป็นสมการเส้นตรงดังสมการ (E5.4-1)

$$y = a_0 + a_1 x + e \qquad \text{(E5.4-1)}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2 \qquad \text{(E5.4-2)}$$

เพื่อหา a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right) = 0 \qquad \text{(E5.4-3)}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2\right) = 0 \qquad \text{(E5.4-4)}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \text{(E5.4-5)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \qquad \text{(E5.4-6)}$$

ดังนั้นเมื่อคำนวณหาค่าต่างๆ ได้ผลการคำนวณจากสมการ (E5.4-5) และ (E5.4-6) ดังตารางที่ E5.4-1

ตารางที่ E5.4-1 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (E5.4-5) และ (E5.4-6)

n	T	η	x=1/T	$y = \ln\eta$	x^2	xy
1	273	1.7870	0.0037	0.5805	1.3418E-05	2.1265E-03

2	278	1.5190	0.0036	0.4181	1.2939E-05	1.5038E-03
3	283	1.3070	0.0035	0.2677	1.2486E-05	9.4606E-04
4	293	1.0020	0.0034	0.0020	1.1648E-05	6.8191E-06
5	303	0.7975	0.0033	-0.2263	1.0892E-05	-7.4678E-04
6	313	0.6529	0.0032	-0.4263	1.0207E-05	-1.3621E-03
sum	1743	7.0654	0.0207	0.6157	7.1591E-05	2.4743E-03

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$0.6157 = 6a_0 + 0.0207a_1 \qquad \text{(E5.4-7)}$$

$$0.00247 = 0.0207a_0 + 7.1590x10^{-5}a_1 \qquad \text{(E5.4-8)}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 และ a_1

$$a_0 = \left| \frac{\begin{matrix} 0.615718152 & 0.020701882 \\ 0.002474318 & 7.15908E-05 \end{matrix}}{\begin{matrix} 6 & 0.020701882 \\ 0.020701882 & 7.15908E-05 \end{matrix}} \right| = -7.310533263$$

$$a_1 = \left| \frac{\begin{matrix} 6 & 0.615718152 \\ 0.020701882 & 0.002474318 \end{matrix}}{\begin{matrix} 6 & 0.020701882 \\ 0.020701882 & 7.15908E-05 \end{matrix}} \right| = 2148.544608$$

จาก a_0 คือ $\ln A$ ดังนั้น $A = \exp\left(a_0\right) = \exp(-7.3105) =$

และ a_1 คือ B ดังนั้น $B = a_1 = 2148.544608$

ดังนั้นสมการของแอนดาร์ดคือ

$$\eta = A\exp\left(\frac{2148.5446}{T}\right)$$

สมการแอนดาร์ดปรับปรุงคือ $\ln\eta = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2}$

ถ้าให้ y คือ $\ln\eta$ a_0 คือ A a_1 คือ B x คือ $\frac{1}{T}$ a_2 คือ C และ x^2 คือ $\frac{1}{T^2}$ จะเห็นว่าเป็นสมการเส้นตรงดังสมการ (E5.4-1)

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + e \qquad \text{(E5.4-9)}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)^2 \quad \text{(E5.4-10)}$$

เพื่อหา a_0 a_1 และ a_2 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right) = 0$$

(E5.4-11)

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2 - a_2 x_i^3\right) = 0 \quad \text{(E5.4-12)}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)x_i^2 = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i^2 - a_0 x_i^2 - a_1 x_i^3 - a_2 x_i^4\right) = 0 \quad \text{(E5.4-13)}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=2}^{n} x_i^2 \quad \text{(E5.4-14)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \quad \text{(E5.4-15)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^{\,2} = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^{\,2} + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4 \quad \text{(E5.4-16)}$$

ดังนั้นเมื่อคำนวณหาค่าต่างๆ ได้ผลการคำนวณจากสมการ (E5.4-14) (E5.4-15) และ (E5.4-16) ดังตารางที่ E5.4-2

ตารางที่ E5.4-2 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (E5.4-14) (E5.4-15) และ (E5.4-16)

n	T	η	x	y	x^2	xy	x^3	x^2y	x^4
1	273	1.7870	0.0037	0.5805	1.34E-05	2.13E-03	4.91E-08	7.79E-06	1.80E-10
2	278	1.5190	0.0036	0.4181	1.29E-05	1.50E-03	4.65E-08	5.41E-06	1.67E-10
3	283	1.3070	0.0035	0.2677	1.25E-05	9.46E-04	4.41E-08	3.34E-06	1.56E-10
4	293	1.0020	0.0034	0.0020	1.16E-05	6.82E-06	3.98E-08	2.33E-08	1.36E-10
5	303	0.7975	0.0033	-0.2263	1.09E-05	-7.47E-04	3.59E-08	-2.46E-06	1.19E-10
6	313	0.6529	0.0032	-0.4263	1.02E-05	-1.36E-03	3.26E-08	-4.35E-06	1.04E-10
sum	1743	7.0654	0.0207	0.6157	7.16E-05	2.47E-03	2.48E-07	9.75E-06	8.62E-10

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$0.6157 = 6a_0 + 0.0207a_1 + 7.16\times10^{-5}a_2 \tag{E5.4-17}$$

$$0.0025 = 0.0207a_0 + 7.16x10^{-5}a_1 + 2.48\times10^{-7}a_2 \tag{E5.4-18}$$

$$9.75\times10^{-6} = 7.16x10^{-5}a_0 + 2.48\times10^{-7}a_1 + 8.62\times10^{-10}a_2 \tag{E5.4-19}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 a_1 และ a_2

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 0.6157 & 0.0207 & 7.16\times10^{-5} \\ 0.0025 & 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} \\ 9.75\times10^{-6} & 2.48\times10^{-7} & 8.62\times10^{-10} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 6 & 0.0207 & 7.16\times10^{-5} \\ 0.0207 & 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} \\ 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} & 8.62\times10^{-10} \end{vmatrix}} = 1.49$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 6 & 0.6157 & 7.16\times10^{-5} \\ 0.0207 & 0.0025 & 2.48\times10^{-7} \\ 7.16\times10^{-5} & 9.75\times10^{-6} & 8.62\times10^{-10} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 6 & 0.0207 & 7.16\times10^{-5} \\ 0.0207 & 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} \\ 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} & 8.62\times10^{-10} \end{vmatrix}} = -2,995.5461$$

$$a_2 = \frac{\begin{vmatrix} 6 & 0.0207 & 0.6157 \\ 0.0207 & 7.16\times10^{-5} & 0.0025 \\ 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} & 9.75\times10^{-6} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 6 & 0.0207 & 7.16\times10^{-5} \\ 0.0207 & 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} \\ 7.16\times10^{-5} & 2.48\times10^{-7} & 8.62\times10^{-10} \end{vmatrix}} = 749,942.3216$$

ดังนั้น a_0 คือ $A = 1.49$

a_1 คือ $B = -2,995.5461$

และ a_2 คือ $C = 749,942.3216$

ดังนั้นสมการแอนดาร์ดปรับปรุงคือ

$$\ln\eta = 1.49 + \frac{-2,995.5461}{T} + \frac{749,942.3216}{T^2}$$

ตัวอย่าง 5.5 สมการ Michaelis-Menten เป็นสมการที่แสดงอัตราการเปลี่ยนแปลงสารอาหารในระหว่างการหมักของจุลินทรีย์ ซึ่งสามารถเขียนได้เป็น

$$-r_s = \frac{V_{\max}[S]}{K_m + [S]}$$

เมื่อ $-r_s$ คืออัตราการหายไปของสารอาหาร (mol/L-s) $[S]$ คือความเข้มข้นของสารอาหาร (mol/L) $V_{\max}$ คืออัตราการหายไปสูงสุดของสารอาหาร (mol/L-s) และ K_m คือค่าคงที่ Michaelis-Menten (mol/L-s) จงหาค่าของ $V_{\max}$ และ K_m จากข้อมูลดังตารางที่ E5.5-1

ตารางที่ E5.5-1 ผลการทดลองอัตราการหายไปของสารอาหารที่ความเข้มข้นของสารอาหารต่างๆ

$[S]$ (mol/L)	1.3	1.8	3	4.5	6	8	9
$-r_s$ (mol/L-s)	0.07	0.13	0.22	0.275	0.335	0.35	0.36

วิธีทำ

สมการ Michaelis-Menten คือ $-r_s = \frac{V_{\max}[S]}{K_m + [S]}$ จัดรูปใหม่ได้เป็น $-\frac{1}{r_s} = \frac{K_m + [S]}{V_{\max}[S]}$

เมื่อ y คือ $-\frac{1}{r_s}$ a_0 คือ $\frac{K_m}{V_{\max}}$ a_1 คือ $\frac{1}{V_{\max}}$ และ x คือ $\frac{1}{[S]}$ จะเห็นว่าเป็นสมการเส้นตรงดังสมการ (E5.5-1)

$$y = a_0 + a_1 x + e \qquad \text{(E5.5-1)}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2 \tag{E5.5-2}$$

เพื่อหา a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right) = 0 \tag{E5.5-3}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2\right) = 0 \tag{E5.5-4}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \tag{E5.5-5}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \tag{E5.5-6}$$

ดังนั้นทำการคำนวณเพื่อหาค่าต่างๆ ในสมการ (E5.5-5) และ (E5.5-6) ได้ผลการคำนวณดังตารางที่ E5.5-1

ตารางที่ E5.5-1 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (E5.5-5) และ (E5.5-6)

n	$[S]$	$(-r_s)$	$x = 1/[S]$	$y = 1/(-r_s)$	x^2	xy
1	1.3	0.07	0.7692	14.2857	0.5917	10.9890
2	1.8	0.13	0.5556	7.6923	0.3086	4.2735
3	3.0	0.22	0.3333	4.5454	0.1111	1.5152
4	4.5	0.275	0.2222	3.6363	0.0494	0.8081
5	6.0	0.335	0.1667	2.9851	0.0278	0.4975
6	8.0	0.35	0.124	2.8571	0.0156	0.3571
7	9.0	0.36	0.1111	2.7778	0.0124	0.3086
sum	33.6	1.74	2.2831	38.7798	1.1166	18.7490

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$38.7798 = 7a_0 + 2.2831a_1 \tag{E5.5-7}$$

$$18.7490 = 2.2831a_0 + 1.1166a_1 \qquad \text{(E5.5-8)}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 และ a_1

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 38.7798 & 2.2831 \\ 18.7490 & 1.1166 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 7 & 2.2831 \\ 2.2831 & 1.1166 \end{vmatrix}} = 0.1902$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 7 & 38.7798 \\ 2.2831 & 18.7490 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 7 & 2.2831 \\ 2.2831 & 1.1166 \end{vmatrix}} = 16.4022$$

จาก $1/a_0$ คือ $V_{\max}$ ดังนั้น $V_{\max} = 1/a_0 = 0.1806$

และ a_1/a_0 คือ K_m ดังนั้น $K_m = a_1/a_0 = 86.2259$

ดังนั้นสมการ Michaelis-Menten คือ $-r_s = \dfrac{V_{\max}[S]}{K_m + [S]} = \dfrac{0.1806[S]}{86.2259 + [S]}$

ตัวอย่าง 5.6 สมการ Michaelis-Menten กำลังสอง (Second-order Michaelis-Menten Equation)เป็นสมการที่ปรับปรุงมาจากสมการ Michaelis-Menten แสดงอัตราการเปลี่ยนแปลงสารอาหารในระหว่างการหมักของจุลินทรีย์ ซึ่งสามารถเขียนได้เป็นสมการ (E5.6-1)

$$-r_s = \frac{V_{\max}[S]^2}{K_m^2 + [S]^2} \qquad \text{(E5.6-1)}$$

เมื่อ $-r_s$ คืออัตราการหายไปของสารอาหาร (mol/L-s) $[S]$ คือความเข้มข้นของสารอาหาร (mol/L) $V_{\max}$ คืออัตราการหายไปสูงสุดของสารอาหาร (mol/L-s) และ K_m คือค่าคงที่ Michaelis-Menten (mol/L-s) จงหาค่าของ $V_{\max}$ และ K_m จากข้อมูลดังตารางที่ E5.6-1 เมื่อใช้สารอาหารคือน้ำตาลซูโคส

ตารางที่ E5.6-1 อัตราการหายไปของสารอาหารที่ความเข้มข้นของน้ำตาลซูโคสต่างๆ

$[S]$ (mol/L)	1.3	1.8	3	4.5	6	8	9
$-r_s$ (mol/L-s)	0.07	0.13	0.22	0.275	0.335	0.35	0.36

วิธีทำ

สมการ Michaelis-Menten กำลังสอง คือ $-r_s = \frac{V_{\max}[S]^2}{K_m^2+[S]^2}$ จัดรูปใหม่ได้เป็น $-\frac{1}{r_s} = \frac{K^2{}_m+[S]}{V^2{}_{\max}[S]^2}$

ถ้าให้ y คือ $-\frac{1}{r_s}$ a_0 คือ $\frac{K^2{}_m}{V_{\max}}$ a_1 คือ $\frac{1}{V_{\max}}$ และ x คือ $\frac{1}{[S]^2}$ จะเห็นว่าเป็นสมการเส้นตรงดังสมการ (E5.6-2)

$$y = a_0 + a_1 x + e \qquad \text{(E5.6-2)}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2 \qquad \text{(E5.6-3)}$$

เพื่อหา a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right) = 0 \qquad \text{(E5.6-4)}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2\right) = 0 \qquad \text{(E5.6-5)}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \text{(E5.6-6)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \qquad \text{(E5.6-7)}$$

ดังนั้นทำการคำนวณเพื่อหาค่าต่างๆ จากสมการ (E5.6-6) และ (E5.6-7)ได้ผลการคำนวณดังตารางที่ E5.6-2

ตารางที่ E5.6-2 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (E5.6-5) และ (E5.6-6)

n	$[S]$	$(-r_s)$	$x=1/[S]^2$	$y=1/(-r_s)$	x^2	xy
1	1.3	0.07	0.5917	14.2857	0.3501	8.4531
2	1.8	0.13	0.3086	7.6923	0.0953	2.3742
3	3.0	0.22	0.1111	4.5455	0.0124	0.5050
4	4.5	0.275	0.0493	3.6364	0.0024	0.1796
5	6.0	0.335	0.0277	2.9851	0.0008	0.0829
6	8.0	0.35	0.0156	2.8571	0.0002	0.0446
7	9.0	0.36	0.0124	2.7778	0.0002	0.0343
sum	33.6	1.74	0.0009	38.7798	0.4613	11.6737

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$38.7798 = 7a_0 + 0.0009a_1 \quad \text{(E5.6-8)}$$

$$11.6737 = 0.0009a_0 + 0.4613a_1 \quad \text{(E5.6-9)}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 และ a_1

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 38.7798 & 0.0008 \\ 11.6737 & 0.4613 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 7 & 0.0008 \\ 0.0008 & 0.4613 \end{vmatrix}} = 5.5367$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 7 & 38.7798 \\ 0.0008 & 11.6737 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 7 & 0.0008 \\ 0.0008 & 0.4613 \end{vmatrix}} = 25.2933$$

จาก $1/a_0$ คือ $V_{\max}$ ดังนั้น $V_{\max} = 1/a_0 = 0.1806$

และ $\sqrt{a_1/a_0}$ คือ K_m ดังนั้น $K_m = \sqrt{a_1/a_0} = 2.1373$

ดังนั้นสมการ Michaelis-Menten กำลังสอง คือ $-r_s = \dfrac{V_{\max}[S]^2}{K_m^2 + [S]^2} = \dfrac{0.1806[S]^2}{2.1373 + [S]^2}$

ตัวอย่าง 5.7 ในการสลายตัวของปฏิกิริยา $A \rightarrow B$ พบว่าอัตราการหายไปของสาร A เป็นปฏิกิริยาอันดับหนึ่งกับความเข้มข้นของสาร A ดังสมการ $-r_A = kC_A$ เมื่อ $-r_A$ คือ อัตราการหายไปของสาร A (mol/L-s) k เป็นค่าคงที่ปฏิกิริยาอันดับหนึ่ง (s^{-1}) และ C_A เป็นความเข้มข้นของสาร A (mol/L) นอกจากนี้ค่าคงที่ปฏิกิริยาสามารถเขียนในรูปสมการดังต่อไปนี้ $k = A_0 \exp(-E_a / RT)$ เมื่อ A_0 คือค่าคงที่ของอารีเนียส์ (s^{-1}) E_a คือค่าพลังงานกระตุ้น (J/mol) R คือค่าคงที่ของก๊าซ ซึ่งมีค่าเท่ากับ 8.314 J/mol-K และ T คือ อุณหภูมิ (K) ในตารางที่ E5.7 แสดงผลการทดลองในการหาอัตราการหายของไปสาร A ที่อุณหภูมิและความเข้มข้นของสาร A ต่างๆ จงหาค่าของ A_0 และ E_A ที่เหมาะสมที่สุด

ตารางที่ E5.7-1 ผลการทดลองในการหาอัตราการหายของไปสาร A ที่อุณหภูมิและความเข้มข้นของสาร A ต่างๆ

$-r_A$ (mol/L-s)	460	960	2485	1600	1245
C_A (mol/L)	200	150	50	20	10
T (K)	280	320	450	500	550

วิธีทำ

จากสมการค่าคงที่ปฏิกิริยา $k = A_0 \exp(-E_A / RT)$ เมื่อแทนลงในสมการ $-r_A = kC_A$ ได้เป็นสมการดังสมการ (E5.7-1)

$$-r_A = A_0 C_A \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad \text{(E5.7-1)}$$

ใส่ ln ในสมการ (E5.7-1) ได้เป็นสมการ (E5.7-2)

$$\ln(-r_A) = \ln A_0 + \ln C_A - \frac{E_A}{R}\left(\frac{1}{T}\right) \text{หรือ } \ln(-r_A) - \ln C_A = \ln A_0 + E_A\left(-\frac{1}{RT}\right) \quad \text{(E5.7-2)}$$

ถ้าให้ y คือ $\ln(-r_A) - \ln C_A$ a_0 คือ $\ln A_0$ a_1 คือ E_A และ x คือ $\frac{-1}{RT}$ จะเห็นว่าเป็นสมการเส้นตรงดังสมการ (E5.5-1)

$$y = a_0 + a_1 x + e \quad \text{(E5.7-3)}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2 \quad \text{(E5.7-4)}$$

เพื่อหา a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right) = 0 \qquad \text{(E5.7-5)}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2\right) = 0 \qquad \text{(E5.7-6)}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \text{(E5.7-7)}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \qquad \text{(E5.7-8)}$$

ดังนั้นทำการคำนวณเพื่อหาค่าต่างๆ ในสมการ (E5.7-7) และ (E5.7-8)ได้ผลการคำนวณดังตารางที่ E5.7-1

ตารางที่ E5.7-1 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (E5.7-5) และ (E5.7-6)

n	T	$-r_A$	C_A	$x = -1/TR$	$y = \ln(-r_A) - \ln C_A$	x^2	xy
1	280	460	200	-0.0004	8.33E-01	1.85E-07	-3.58E-04
2	320	960	150	-0.0004	1.86E+00	1.41E-07	-6.98E-04
3	450	2485	50	-0.0003	3.91E+00	7.14E-08	-1.04E-03
4	500	1600	20	-0.0002	4.38E+00	5.79E-08	-1.05E-03
5	550	1245	10	-0.0002	4.82E+00	4.78E-08	-1.06E-03
sum				-0.0015	1.58E+01	5.03E-07	-4.21E-03

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$15.80 = 5a_0 - 0.0015a_1 \qquad \text{(E5.5-9)}$$

$$-4.21\times10^{-3} = -0.0015a_0 + 5.03\times10^{-7} a_1 \qquad \text{(E5.5-10)}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 และ a_1

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 1.58E+01 & -1.53E-03 \\ -4.21E-03 & 5.03E-07 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & -1.53E-03 \\ -1.53E-03 & 5.03E-07 \end{vmatrix}} = 8.9386$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 1.58E+01 \\ -1.53E-03 & -4.21E-03 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & -1.53E-03 \\ -1.53E-03 & 5.03E-07 \end{vmatrix}} = 18,858.9616$$

จาก a_0 คือ $\ln A_0$ ดังนั้น $A_0 = \exp(a_0) = \exp(8.9386) = 7.62\times 10^3$

และ a_1 คือ B ดังนั้น $E_a = a_1 = 1.89\times 10^4$

ดังนั้น ค่าคงที่ปฏิกิริยาสามารถเขียนในรูปสมการดังต่อไปนี้

$$k = A_0 \exp(-E_a / RT) = 7.62\times 10^3 \exp\left(-\frac{1.89x10^4}{RT}\right)$$

5.5 การถดถอยแบบพหุนาม

สมการพหุนามมีรูปแบบสมการทั่วไปคือ

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n +$$

ดังนั้นค่าความคลาดเคลื่อนสำหรับสมการพหุนามกำลังสองสามารถเขียนได้เป็น

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

หรือ

$$e = y - a_0 - a_1 x - a_2 x^2$$

ประยุกต์ใช้ความรู้ที่เรียนมาจากการหาการถดถอยเชิงเส้น ถ้าให้ S_r เป็นผลบวกของค่าความคลาดเคลื่อนยกกำลังสอง ดังสมการ (5.23)

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)^2 \tag{5.23}$$

จากสมการ (5.23) เราสามารถหา a_0 a_1 และ a_2 เพื่อให้ได้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดได้จากสมการ (5.24) (5.25) และ (5.26) สำหรับหาค่า a_0 a_1 และ a_2

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right) = 0 \tag{5.24}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)x_i = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2 - a_2 x_i^3\right) = 0 \tag{5.25}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2\right)x_i^2 = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i^2 - a_0 x_i^2 - a_1 x_i^3 - a_2 x_i^4\right) = 0 \tag{5.26}$$

จากสมการ (5.24) (5.25) และ (5.26) สามารถให้อยู่ในรูปสมการดังนี้

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^2$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i^2 = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^4$$

ค่าสัมประสิทธิ์ของการถดถอยพหุนามกำลัง m สามารถแสดงดังสมการ (5.27)

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \tag{5.16}$$

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i \right)^2$$

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-(m+1)}}$$

ตัวอย่าง 5.8 สมการของ Beattie-Bridgeman เป็นสมการอธิบายความสัมพันธ์ระหว่างปริมาตรจำเพาะกับความดันของก๊าซดังนี้ $\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2}$ เมื่อ P คือความดัน (atm) V คือปริมาตรจำเพาะ (L/mol) R คือค่าคงที่ของก๊าซ และ T เป็นอุณหภูมิ (K) และ B และ C คือค่าคงที่ ซึ่งได้ทำการวัดหาปริมาตรจำเพาะและความดันที่อุณหภูมิ 303 K เมื่อใช้สมการพหุนามกำลังสอง $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$ พบว่าให้ข้อมูลดังตารางที่ E5.8-1 ต่อไปนี้

ตารางที่ E5.8-1 ความสัมพันธ์ระหว่างความดันและปริมาตรจำเพาะ

P (atm)	0.985	1.108	1.363	1.631
V (mL/mol)	25,000	22,200	18,000	15,000

วิธีทำ

จากสมการปริมาตรจำเพาะกับความดันของก๊าซดังสมการ (E5.8-1)

$$\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2} \tag{E5.8-1}$$

คูณสมการ (E5.8-1) ด้วย V^2 จะได้เป็นสมการ (E5.8-2)

$$\frac{PV^3}{RT} = V^2 + \frac{BV^2}{V} + C \tag{E5.8-2}$$

จัดรูปสมการใหม่ได้เป็นสมการ (E5.8-3)

$$\frac{PV^3}{RT} = C + BV + V^2 \tag{E5.8-3}$$

จากสมการ (E5.8-3) มีรูปแบบของสมการพหุนามกำลังสอง $y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ ซึ่งจากสมการ (E5.8-3) เมื่อเทียบกับสมการพหุนามกำลังสองพบว่าค่าของ a_2 เท่ากับ 1

ถ้ากำหนดให้ y คือ $\frac{PV^3}{RT}$ a_0 คือ C a_1 คือ B และ x คือ V

$$y = a_0 + a_1 x + x^2 + e \tag{E5.8-4}$$

เพื่อให้ค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุด

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - x_i^2 \right)^2 \tag{E5.8-5}$$

เพื่อหา a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดดังนั้น

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - x_i^2 \right) = 0 \tag{E5.8-6}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i - x_i^2 \right) x_i = -2\sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i - a_0 x_i - a_1 x_i^2 - x_i^3 \right) = 0 \tag{E5.8-7}$$

ดังนั้น

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i + \sum_{i=2}^{n} x_i^2 \text{ หรือ } \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - x_i^2 \right) = a_0 n + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i \tag{E5.8-8}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_i x_i = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{n} x_i^3 \text{ หรือ } \sum_{i=1}^{n} \left(y_i x_i - x_i^3 \right) = a_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 \tag{E5.8-9}$$

n	P(atm)	V(mL)	x (L)	$y = \frac{PV^3}{RT}$	x^2	$y - x^2$	$xy - x^3$
1	0.985	25000	25	619.441	625.000	-5.559	-138.981
2	1.108	22200	22	487.913	492.840	-4.927	-109.384
3	1.363	18000	18	319.931	324.000	-4.069	-73.234
4	1.631	15000	15	221.550	225.000	-3.450	-51.754
sum	5.087	80200	80	1648.835	1666.840	-18.005	-373.353

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$-18.005 = 4a_0 + 80a_1 \tag{E5.8-10}$$

$$-373.353 = 80a_0 + 1666.840a_1 \tag{E5.8-11}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 และ a_1

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} -18.005 & 80.200 \\ -373.353 & 1666.840 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 4.000 & 80.200 \\ 80.200 & 1666.840 \end{vmatrix}} = \frac{-68.991}{235.32} = -0.293$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 4.000 & -18.005 \\ 80.200 & -373.353 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 4.000 & 80.200 \\ 80.200 & 1666.840 \end{vmatrix}} = \frac{-49.390}{235.32} = -0.210$$

จาก $a_0 = C$ ดังนั้น $C = -0.293$ และ $a_1 = B$ คือ $B = -0.210$ เมื่อแทนค่าต่างๆ ลงในสมการแสดงความสัมพันธ์ระหว่างปริมาตรจำเพาะกับความดันของก๊าซ $\frac{PV}{RT} = 1 - \frac{0.293}{V} - \frac{0.210}{V^2}$ ได้เป็น $\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{V} + \frac{C}{V^2}$

5.6 การถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณ

การถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณ (Multiple Linear Regression) เป็นการศึกษาความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรอิสระหลายตัวกับตัวแปรตาม 1 ตัว โดยทั่วไปการถดถอยเชิงเส้นแบบพหุคูณสามารถเขียนในรูปสมการทั่วไปดังสมการ (5.28)

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + e$$

ดังนั้น

$$e = y - a_0 - a_1x_1 - a_2x_2$$

ถ้าให้ S_r เป็นผลบวกของค่าความคลาดเคลื่อนยกกำลังสอง ดังสมการ (5.23)

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i} \right)^2 \tag{5.23}$$

จากสมการ (5.23) เราสามารถหา a_0 a_1 และ a_2 เพื่อให้ได้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดได้จากสมการ (5.24) (5.25) และ (5.26) สำหรับหาค่า a_0 a_1 และ a_2

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right) = 0 \qquad (5.24)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right)x_{1,i} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_ix_{1,i} - a_0x_{1,i} - a_1x_{1,i}^2 - a_2x_{2,i}x_{1,i}\right) = 0 \qquad (5.25)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right)x_{2,i} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_ix_{2,i} - a_0x_{2,i} - a_1x_{1,i}x_{2,i} - a_2x_{2,i}^2\right) = 0 \qquad (5.26)$$

จากสมการ (5.24) (5.25) และ (5.26) สามารถให้อยู่ในรูปสมการดังนี้

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0 n + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i} + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_ix_{1,i} = a_0\sum_{i=1}^{n} x_{1,i} + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i}^2 + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i}x_{1,i}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_ix_{2,i} = a_0\sum_{i=1}^{n} x_{2,i} + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i}x_{2,i} + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i}^4$$

ตัวอย่าง 5.9 Asirvatham et al. (2009) ได้ทำทดลองการหาค่าการถ่ายเทความร้อนการพาแบบบังคับสำหรับของไหลที่เป็น CuO ขนาดนาโนเมตรและน้ำ ซึ่งจากการทดลองพบว่ามีความสัมพันธ์ดังนี้

$Nu = A\,\mathrm{Re}^{0.59}\,\mathrm{Pr}^{B}\left(\frac{D}{x}\right)^{C}$ เมื่อ A B และ C เป็นค่าคงที่ และมีผลการทดลองดังตารางที่ E5.9-1 จงหาค่า Nu ที่ Re เท่ากับ 350 Pr เท่ากับ 3000 และ $\frac{D}{x}$ (D/x) เท่ากับ 100

ตารางที่ E5.9-1 ผลการทดลองการถ่ายเทความร้อนการพาแบบบังคับสำหรับของไหลที่เป็น CuO ขนาดนาโนเมตรและน้ำ

Re	Pr	D/X	Nu
1000	5000	10	431
2000	5000	10	649
3000	7500	20	1237
2000	6500	40	1205
6000	4000	80	2531

ที่มา : Asirvatham et al. (2009)

วิธีทำ

จากสมการ (E5.9-1)

$$Nu = A\,\mathrm{Re}^{0.59}\,\mathrm{Pr}^{B}\left(\frac{D}{x}\right)^{C} \tag{E5.9-1}$$

เปลี่ยนสมการ (E5.9-1) ด้วยการใส่เครื่องหมาย log ได้เป็นสมการ (E5.9-2)

$$\log\left(\frac{Nu}{\mathrm{Re}^{0.59}}\right) = \log A + B\log \mathrm{Pr} + C\log\left(\frac{D}{x}\right) \tag{E5.9-2}$$

กำหนดให้ y คือ $\log\left(\frac{Nu}{\mathrm{Re}^{0.59}}\right)$ x_1 คือ $\log \mathrm{Pr}$ x_2 คือ $\log\left(\frac{D}{x}\right)$ a_0 คือ $\log A$ a_1 คือ B และ a_2 คือ C ได้ดังสมการสำหรับการทำนายดังสมการ (E5.9-3)

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 \tag{E5.9-3}$$

ให้ S_r เป็นผลบวกของค่าความคลาดเคลื่อนยกกำลังสอง ดังสมการ (E5.9-4)

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right)^2 \tag{E5.9-4}$$

จากสมการ (5.9-4) เราสามารถหา a_0 a_1 และ a_2 เพื่อให้ได้ผลรวมค่าความคลาดเคลื่อนต่ำสุดได้ ดังสมการ (E5.9-5) (E5.9-6) และ (E5.9-7) เพื่อหาค่า a_0 a_1 และ a_2

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right) = 0 \tag{E5.9-5}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right)x_{1,i} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_ix_{1,i} - a_0x_{1,i} - a_1x_{1,i}^2 - a_2x_{2,i}x_{1,i}\right) = 0 \tag{E 5.9-6}$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - a_0 - a_1x_{1,i} - a_2x_{2,i}\right)x_{2,i} = -2\sum_{i=1}^{n}\left(y_ix_{2,i} - a_0x_{2,i} - a_1x_{1,i}x_{2,i} - a_2x_{2,i}^2\right) = 0 \tag{E 5.9-7}$$

จากสมการ (E 5.9-5) (E 5.9-6) และ (E 5.9-7) สามารถให้อยู่ในรูปสมการดังนี้

$$\sum_{i=1}^{n} y_i = a_0n + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i} + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i} \tag{E 5.9-8}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_ix_{1,i} = a_0\sum_{i=1}^{n} x_{1,i} + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i}^2 + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i}x_{1,i} \tag{E 5.9-9}$$

$$\sum_{i=1}^{n} y_ix_{2,i} = a_0\sum_{i=1}^{n} x_{2,i} + a_1\sum_{i=1}^{n} x_{1,i}x_{2,i} + a_2\sum_{i=1}^{n} x_{2,i}^2 \tag{E 5.9-10}$$

ตารางที่ E5.9-1 ตารางประกอบการคำนวณตามสมการ (5.9-8) (5.9-9)และ (E5.9-10)

n	x_1	x_1^2	x_2	x_2^2	y	x_1y	x_2y	$x_1 x_2$
1	3.6990	13.6824	1.0000	1.0000	0.8645	3.1977	0.8645	3.6990
2	3.6990	13.6824	1.0000	1.0000	0.8646	3.1983	0.8646	3.6990
3	3.8751	15.0161	1.3010	1.6927	1.0409	4.0334	1.3542	5.0416
4	3.8129	14.5383	1.6021	2.5666	1.1334	4.3215	1.8157	6.1085
5	3.6021	12.9748	1.9031	3.6218	1.1742	4.2295	2.2346	6.8550
sum	18.6880	69.8940	6.8062	9.8810	5.0775	18.9803	7.1336	25.4031

สามารถเขียนในรูปสมการได้เป็น

$$5.0775 = 5a_0 + 18.6880a_1 + 6.8062a_2 \tag{5.9-11}$$

$$18.9803 = 18.6880a_0 + 6.8062a_1 + 25.4031a_2 \tag{5.9-12}$$

$$7.1336 = 6.8062a_0 + 25.4031a_1 + 9.8810a_2 \tag{5.9-13}$$

ใช้กฎคราเมอร์ในการหาค่าของ a_0 a_1 และ a_2

$$a_0 = \frac{\begin{vmatrix} 5.0775 & 18.6880 & 6.8062 \\ 18.9803 & 69.8940 & 25.4031 \\ 7.1336 & 25.4031 & 9.8810 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & 18.6880 & 6.8062 \\ 18.6880 & 69.8940 & 25.4031 \\ 6.8062 & 25.4031 & 9.8810 \end{vmatrix}} = \frac{-0.1097}{0.1351} = -0.8116$$

$$a_1 = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 5.0775 & 6.8062 \\ 18.6880 & 18.9803 & 25.4031 \\ 6.8062 & 7.1336 & 9.8810 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & 18.6880 & 6.8062 \\ 18.6880 & 69.8940 & 25.4031 \\ 6.8062 & 25.4031 & 9.8810 \end{vmatrix}} = \frac{0.0473}{0.1351} = 0.3503$$

$$a_2 = \frac{\begin{vmatrix} 5 & 18.6880 & 5.0775 \\ 18.6880 & 69.8940 & 18.9803 \\ 6.8062 & 25.4031 & 7.1336 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 5 & 18.6880 & 6.8062 \\ 18.6880 & 69.8940 & 25.4031 \\ 6.8062 & 25.4031 & 9.8810 \end{vmatrix}} = \frac{0.0514}{0.1351} = 0.3804$$

จาก a_0 คือ $\log A$ ดังนั้น $A = 10^{a_0} = 10^{-8.116} = 0.1543$ และ a_1 คือ B ดังนั้น $B = 0.3503$ และ a_2 คือ C ดังนั้น $C = 0.3804$ เมื่อแทนลงในสมการการหาค่าการถ่ายเทความร้อนการพาแบบบังคับสำหรับของไหลที่เป็น CuO ขนาดนาโนเมตรและน้ำ ได้เป็น

$$Nu = A\,\mathrm{Re}^{0.59}\,\mathrm{Pr}^{B}\left(\frac{D}{x}\right)^{C} = 0.1543\,\mathrm{Re}^{0.59}\,\mathrm{Pr}^{0.3503}\left(\frac{D}{x}\right)^{0.3804}$$

ดังนั้นเมื่อ Re เท่ากับ 350 Pr เท่ากับ 3000 และ $\dfrac{D}{x}$ เท่ากับ 100 จะได้ค่า

$$Nu = 0.1543\,\mathrm{Re}^{0.59}\,\mathrm{Pr}^{0.3503}\left(\frac{D}{x}\right)^{0.3804} = 0.1543x350^{0.59}\,\mathrm{x}\,3000^{0.3503}\left(100\right)^{0.3804} = 465.802$$

5.7 การถดถอยไม่เชิงเส้น

การถดถอยไม่เชิงเส้น (Nonlinear Regression) สามารถประยุกต์ใช้ความรู้จากการถดถอยเชิงเส้น ตัวอย่างเช่น $y = a_0\left(1-e^{-a_1 x}\right)+e$ ดังนั้นรูปสมการทั่วไปดังสมการ (5.27)

$$y = a_0\left(1-e^{-a_1 x}\right)+e \tag{5.27}$$

ดังนั้นสามารถเขียนในรูปทั่วไปดังสมการ (5.28)

$$y_i = f(x_i)+e_i \tag{5.28}$$

การถดถอยไม่เชิงเส้นด้วยวิธีการของ Gauss-Newton เมื่อประยุกต์ใช้อนุกรมเทย์เลอร์สำหรับหาตัวแปร a_0 และ a_1 ดังสมการ (5.29)

$$f(x_i)_{j+1} = f(x_i)_j + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_0}\Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_1}\Delta a_1 \tag{5.29}$$

เมื่อ j เป็นค่าเริ่มต้น และ j+1 เป็นค่าที่ได้จากการทำนาย $\Delta a_0 = a_{0,j+1} - a_{0,j}$ และ $\Delta a_1 = a_{1,j+1} - a_{1,j}$ และสมการ (5.29) สามารถเขียนได้เป็นสมการ (5.30)

$$y_i - f(x_i)_j = \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_0}\Delta a_0 + \frac{\partial f(x_i)_j}{\partial a_1}\Delta a_1 + e_i \qquad (5.30)$$

สมการ (5.30) สามารถเขียนในรูปเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\{D\} = [Z_j]\{\Delta A\} + \{E\}$$

เมื่อ

$$[Z_j] = \begin{bmatrix} \partial f_1/\partial a_0 & \partial f_1/\partial a_1 \\ \partial f_2/\partial a_0 & \partial f_2/\partial a_1 \\ \vdots & \vdots \\ \partial f_n/\partial a_0 & \partial f_n/\partial a_1 \end{bmatrix} \quad [D] = \begin{bmatrix} y_1 - f(x_1) \\ y_2 - f(x_2) \\ \vdots \\ y_n - f(x_n) \end{bmatrix} \text{ และ } \{\Delta A\} = \begin{Bmatrix} \Delta a_0 \\ \Delta a_1 \\ \vdots \\ \Delta a_{n-1} \end{Bmatrix}$$

แก้สมการโดย

$$[Z_j]^T [Z_j]\{\Delta A\} = [Z_j]^T \{D\}$$

แล้วคูณด้วยอินเวอร์

$$[Z_j]^T [Z_j]\{\Delta A\} = [Z_j]^T \{D\}$$

ทำให้สามารถหาค่าของ $\{\Delta A\}$ ได้เมื่อ

$$a_{0,j+1} = a_{0,j} + \Delta a_0$$

$$a_{1,j+1} = a_{1,j} + \Delta a_1$$

$$|\varepsilon_a|_k = \left|\frac{a_{k,j+1} - a_{k,j}}{a_{k,j+1}}\right| x100\%$$

ตัวอย่าง 5.10 ปฏิกิริยาการสลายตัวของ A⟶B สามารถเขียนความเข้มข้นของสาร B ได้ดังสมการ $C_B = C_{A0}\left(1 - e^{-kt}\right)$ เมื่อ C_{A0} คือความเข้มข้นของสาร A ที่เวลาเริ่มต้น(mol/L) C_B คือความเข้มข้นของสาร B ที่เวลาใดๆ (mol/L) และ k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (min^{-1}) ซึ่งให้ผลการทดลองดังตารางที่ E5.10-1 จงหาค่าคงที่ปฏิกิริยาและความเข้มข้นเริ่มต้นของสาร A เมื่อใช้การถดถอยไม่เชิงเส้นด้วยวิธีการของ Gauss-Newton

ตารางที่ E5.10-1 ความเข้มข้นของสาร B ที่เวลาใดๆ

t (min)	0.25	0.75	1.25	1.75	2.25
C_B (mol/L)	0.28	0.57	0.68	0.74	0.79

วิธีทำ

$$\frac{\partial f}{\partial C_{A0}} = 1 - e^{-kt} \text{ และ } \frac{\partial f}{\partial k} = C_{A0} t e^{-kt}$$

สมมุติให้ ค่าเริ่มต้นของ C_{A0} และ k มีค่าเท่ากับ 1 และ 1 ตามลำดับ

เมื่อแทนค่า t และ C_B ลงใน $\{D\}=[Z_j]\{\Delta A\}+\{E\}$

$$[Z_0]=\begin{bmatrix}\partial f_1/\partial C_{A0} & \partial f_1/\partial k\\ \partial f_2/\partial C_{A0} & \partial f_2/\partial k\\ \partial f_3/\partial C_{A0} & \partial f_3/\partial k\\ \partial f_4/\partial C_{A0} & \partial f_4/\partial k\\ \partial f_5/\partial C_{A0} & \partial f_5/\partial k\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0.2212 & 0.1947\\ 0.5276 & 0.3543\\ 0.7135 & 0.3581\\ 0.8262 & 0.3041\\ 0.8946 & 0.2371\end{bmatrix}$$

$$[Z_0]^T[Z_0]=\begin{bmatrix}0.2212 & 0.5276 & 0.7135 & 0.8262 & 0.8946\\ 0.1947 & 0.3543 & 0.3581 & 0.3041 & 0.2371\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0.2212 & 0.1947\\ 0.5276 & 0.3543\\ 0.7135 & 0.3581\\ 0.8262 & 0.3041\\ 0.8946 & 0.2371\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2.3193 & 0.9489\\ 0.9489 & 0.4404\end{bmatrix}$$

$$\{D\}=\begin{Bmatrix}0.28-0.2212\\ 0.57-0.5276\\ 0.68-0.7135\\ 0.74-0.8262\\ 0.79-0.8946\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}0.0588\\ 0.0424\\ -0.0335\\ -0.0862\\ -0.1046\end{Bmatrix}$$

$$[Z_0]^T\{D\}=\begin{bmatrix}0.2212 & 0.5276 & 0.7135 & 0.8262 & 0.8946\\ 0.1947 & 0.3543 & 0.3581 & 0.3041 & 0.2371\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}0.0588\\ 0.0424\\ -0.0335\\ -0.0862\\ -0.1046\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}-0.1533\\ -0.0365\end{bmatrix}$$

$$[Z_0]^T[Z_0]\{\Delta A\}=[Z_0]^T\{D\}$$

$$\begin{bmatrix}2.3193 & 0.9489\\ 0.9489 & 0.4404\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\Delta C_{A0,0}\\ \Delta k_0\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}-0.1533\\ -0.0365\end{bmatrix}$$

$$\begin{Bmatrix}\Delta C_{A0,0}\\ \Delta k_0\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}2.3193 & 0.9489\\ 0.9489 & 0.4404\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}-0.1533\\ -0.0365\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}3.6397 & -7.8421\\ -7.8421 & 19.1678\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-0.1533\\ -0.0365\end{bmatrix}=\begin{Bmatrix}-0.2714\\ 0.5019\end{Bmatrix}$$

ดังนั้น

$$\begin{Bmatrix}C_{A0,1}\\ \Delta k_1\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}1.0\\ 1.0\end{Bmatrix}+\begin{Bmatrix}-0.2714\\ 0.5019\end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix}0.7286\\ 1.5019\end{Bmatrix}$$

ดังนั้นทำเช่นนี้ไปเรื่อยจะพบว่า $\begin{Bmatrix} C_{A0,1} \\ \Delta k_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0.79186 \\ 1.6751 \end{Bmatrix}$

5.8 แบบฝึกหัด

HM5.1 ในการหาอันดับปฏิกิริยาด้วยวิธีครึ่งชีวิตพบว่ามีสมการ (HM5.1-1)

$$t_{1/2} = \frac{2^{\alpha-1}-1}{k(\alpha-1)}\left[\frac{1}{C_{A0}^{\alpha-1}}\right] \quad \text{(HM5.1-1)}$$

เมื่อ $t_{1/2}$ คือเวลาที่ให้ความเข้มข้นของสารเหลือความเข้มข้นเป็นครึ่งของความเข้มข้นเริ่มต้น (min) α คืออันดับปฏิกิริยา C_{A0} คือความเข้มข้นของสารที่เวลาเริ่มต้น (mol/L) และ k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา จากผลการทดลองปฏิกิริยา A $\longrightarrow$ B + 2C ดังตารางที่ HM5.1-1 จงหาอันดับปฏิกิริยาและค่าคงที่ปฏิกิริยา

ตารางที่ HM5.1-1 ผลการทดลองของ $t_{1/2}$ ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของสารต่างๆ

$t_{1/2}$ (min)	8.03	8.62	9.26	9.49	8.43
C_{A0} (mol/L)	0.2476	0.1944	0.162	0.1069	0.0745

HM5.2 อัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ในกระบวนการหมักสามารถใช้แบบจำลองดังสมการ (HM5.2-1)

$$Y = \frac{kC^2}{1+aC+bC^2} \quad \text{(HM5.2-1)}$$

เมื่อ k a และ b เป็นค่าคงที่ C เป็นความเข้มข้นของสารอาหาร (mg/L) และ Y คือ อัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ (Y, mg/L-day) และให้ผลการทดลองดังตารางที่ HM5.2-1

ตารางที่ HM5.2-1 ผลการทดลองอัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ที่ความเข้มข้นของสารอาหารต่างๆ

C, mg/L	0.5	0.8	1.5	2.5	4
Y, mg/L-day	1.1	2.4	5.3	7.6	8.9

จงหาค่าคงที่ k a และ b พร้อมทั้งประมาณค่าอัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ที่ความเข้มข้นของสารอาหารเป็น 2.0 mg/L

HM5.3 ในการดูดซับสีย้อมด้วยถ่านกัมมันต์พบว่าเป็นไปตามสมการ (HM5.3-1) ดังต่อไปนี้

$$q_e = \frac{q_s C_{BET} C_e}{(C_s - C_e)[1+(C_{BET}-1)(C_e/C_s)]} \quad \text{(HM5.3-1)}$$

เมื่อ q_s ความจุอิ่มตัวทางทฤษฎี (mg/g) q_e ปริมาณการดูดซับสีบนตัวดูดซับที่สมดุล (mg/g) C_{BET} ค่าคงที่ BET (L/mg) C_e ความเข้มข้นสีที่สมดุล (mg/L) C_S ความเข้มข้นสีที่ดูดซับอิ่มตัวแบบโมโนเลเยอร์ (mg/L)

ซึ่งให้ผลการทดลองดังตารางที่ HM5.3-1 เมื่อความเข้มข้นสีที่ดูดซับอิ่มตัวแบบโมโนเลเยอร์เท่ากับ 10 mg/L

ตารางที่ HM5.3-1 ผลการทดลองหาค่าความเข้มข้นสีที่สมดุลและปริมาณการดูดซับสีบนตัวดูดซับที่สมดุล

C_e (mg/L)	6	7	8	9
q_e (mg/g)	5.41	5.87	7.73	14.12

จงหาค่าคงที่ C_{BET} และ q_s พร้อมทั้งทำนายปริมาณการดูดซับสีบนตัวดูดซับที่สมดุลถ้าความเข้มข้นสีที่ดูดซับอิ่มตัวแบบโมโนเลเยอร์เท่ากับ 15 mg/L และความเข้มข้นสีที่สมดุลเท่ากับ 10 mg/L

HM5.4 จำนวนจุลินทรีย์ที่ทำให้เกิดโรคในทะเลสาบมี 3 ชนิด คือ A B C และเป็นไปตามสมการ (HM5.4-1)

$$p(t) = Ae^{-1.5t} + Be^{-0.3t} + Ce^{-0.05t} \qquad \text{(HM5.4-1)}$$

เมื่อp(t) เป็นจำนวนจุลินทรีย์ทั้งหมด (CFU/100mL) t คือเวลาในการเก็บตัวอย่าง (hr) A B และ C คือจำนวนเริ่มต้นของประชากรจุลินทรีย์ชนิด A B และ C ตามลำดับ และมีหน่วยเป็น (CFU/100mL) จากการนับจำนวนประชากรจุลินทรีย์ในทะเลสาบที่เวลาต่างๆ เป็นดังตารางที่ HM5.4-1

ตารางที่ HM5.4-1 จำนวนประชากรจุลินทรีย์ในทะเลสาบที่เวลาต่างๆ

t,hr	0.5	1	2	3	4	5	6	7	9
p(t)	6.0	4.4	3.2	2.7	2.2	1.9	1.7	1.4	1.1

จงทำนายจำนวนประชากรจุลิทรีย์ทั้งหมดที่เวลา 20 hr

HM5.5 การพาความร้อนภายในท่อเรียบสามารถใช้สมการของ Colbrn ในการหาซึ่งพบว่าเป็นไปตามสมการ (HM5.5-1)

$$Nu = a\,\mathrm{Re}^m\,\mathrm{Pr}^n \qquad \text{(HM5.5-1)}$$

เมื่อ Nu คือเลขนัสเสลท์ Re คือเลขเรย์โนลด์ และ Pr คือเลขแพรนดัล เมื่อทำการทดลองวัดค่าเลขนัสเสลท์ที่เลขเรย์โนลด์ และเลขแพรนดัลให้ผลการทดลองดังตารางที่ HM5.5-1 จงหาเลขนัสเสลท์เมื่อเลขเรย์โนลด์เท่ากับ 9000 และเลขแพรนดัลเท่ากับ 40 เมื่อ a มีค่าเท่ากับ 0.36

ตารางที่ HM5.5-1 ผลการวัดค่าเลขนัสเสลท์ที่เลขเรย์โนลด์ และเลขแพรนดัลต่างๆ

Re	Pr	Nu
1000	10	34
2000	20	63
4000	20	93
8000	10	108
16000	50	269
32000	30	332

5.9 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. สุริยา พันธ์โกศล และ คณิต กฤษณังกูร, การทำนายความหนืดจลน์ของไบโอดีเซลที่อุณหภูมิต่างๆ จากค่าสะปอนนิฟิเคชันและค่าไอโอดีน, วารสารวิจัยและพัฒนา มจธ. ปีที่ 39 ฉบับที่ 2 เมษายน - มิถุนายน 2559

http://pioneer.netserv.chula.ac.th/~ltachai/210/lecture_notes/ch08.pdf

https://www.eng.auburn.edu/~clemept/CEANALYSIS_FALL2011/Week1/non_Linearregression_paper.pdf

4. Lazarus Godson Asirvatham, Nandigana Vishal, Senthil Kumar Gangatharan and Dhasan Mohan Lal ,Experimental Study on Forced Convective Heat Transfer with Low Volume Fraction of CuO/Water Nanofluid, Energies 2009, 2, 97-119

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 8

หัวข้อการสอน

บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง หัวข้อ 6.1 – 6.2

การกำหนดหัวข้อการประยุกต์ใช้วิธีการแก้ปัญหาในวิชาต่างๆ ที่ได้เรียนไป/กรณีศึกษารายงาน

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่จำเป็นใช้การประมาณค่าในช่วง
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามเนื้อหา

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 9

หัวข้อการสอน

บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง หัวข้อ 6.3 – 6.5

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของนิวตัน
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของลากรานจ์
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการประมาณค่าในช่วงด้วย Spline

เนื้อหา

1. การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของนิวตัน
2. การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของลากรานจ์
3. การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง 10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ 120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา 50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 6 การประมาณค่าในช่วง

6.1 บทนำ

ในงานทางวิศวกรรมศาสตร์ส่วนใหญ่จะมีข้อมูลที่ได้ทำการศึกษาเป็นบางจุดอยู่แล้ว แต่ยังไม่ครอบคลุมกับงานทางวิศวกรรมทั้งหมด เช่น ตารางไอน้ำ ตารางความหนาแน่นของน้ำ เป็นต้น ตัวอย่างการใช้งานข้อมูลทางวิศวกรรมเช่น โรงงานติดตั้งมาตรวัดอัตราการไหลของน้ำ ซึ่งมีหน่วยเป็น m^3/h อยู่แล้ว แต่ถ้าโรงงานจำเป็นต้องหาอัตราการไหลของน้ำเชิงมวล เพื่อใช้ในการผลิต โดยทั่วไปการเปลี่ยนอัตราการไหลเชิงปริมาตรให้เป็นอัตราการไหลเชิงมวลโดยการนำความหนาแน่นของน้ำที่อุณหภูมิดังกล่าวมาใช้ แต่ความหนาแน่นของน้ำสามารถหาได้จากตารางความหนาแน่นของน้ำ ซึ่งจะมีตัวเลขเป็นจุด ดังตารางที่ 6.1 ดังนั้นจึงจำเป็นต้องมีการประมาณค่าความหนาแน่นของน้ำที่อุณหภูมิดังกล่าว

ตารางที่ 6.1 ความหนาแน่นของน้ำที่อุณหภูมิระหว่าง 10 – 80 °C ความดัน 1 atm

อุณหภูมิ	ความหนาแน่นที่ของเหลว 1 atm				
°C	g/cm^3]	kg/m^3	sl/ft^3	lb$_m$/ft^3	lb$_m$/gal(US liq)
10	0.9997000	999.70	1.9397	62.4094	8.3429
15	0.9991026	999.10	1.9386	62.3719	8.3379
20	0.9982067	998.21	1.9368	62.3160	8.3304
25	0.9970470	997.05	1.9346	62.2436	8.3208
30	0.9956488	995.65	1.9319	62.1563	8.3091
35	0.9940326	994.03	1.9287	62.0554	8.2956
40	0.9922152	992.22	1.9252	61.9420	8.2804
45	0.99021	990.21	1.9213	61.8168	8.2637
50	0.98804	988.04	1.9171	61.6813	8.2456
55	0.98569	985.69	1.9126	61.5346	8.2260
60	0.98320	983.20	1.9077	61.3792	8.2052
65	0.98055	980.55	1.9026	61.2137	8.1831
70	0.97776	977.76	1.8972	61.0396	8.1598
75	0.97484	974.84	1.8915	60.8573	8.1354
80	0.97179	971.79	1.8856	60.6669	8.1100

6.2 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนาม

สมการพหุนามสำหรับชุดข้อมูลที่มีจำนวนข้อมูล $n+1$ ข้อมูล จะสามารถเขียนสมการพหุนามได้ดังสมการ (6.1)

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n \tag{6.1}$$

เมื่อ $a_0, a_1, \ldots, a_n$ เป็นสัมประสิทธิ์

ตัวอย่างเช่นสำหรับตัวอย่างที่มีจำนวนข้อมูล 4 จุด คือ (x_1,y_1) (x_2,y_2) (x_3,y_3) (x_4,y_4) ดังนั้นค่า n มีค่าเท่ากับ 3 และสามารถเขียนสมการพหุนามได้ดังสมการ (6.2)

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 \tag{6.2}$$

เพื่อหาค่า a_0, a_1, a_2, a_3 สามารถทำได้โดยการแทนค่าข้อมูลลงในสมการ (6.2) ซึ่งสามารถสร้างสมการได้ทั้งหม 4 สมการดังนี้

$$y_1 = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + a_3 x_1^3$$

$$y_2 = a_0 + a_1 x_2 + a_2 x_2^2 + a_3 x_2^3$$

$$y_3 = a_0 + a_1 x_3 + a_2 x_3^2 + a_3 x_3^3$$

$$y_4 = a_0 + a_1 x_4 + a_2 x_4^2 + a_3 x_4^3$$

ชุดสมการข้างบนสามารถเขียนในรูปของเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$y_4 = a_0 + a_1 x_4 + a_2 x_4^2 + a_3 x_4^3$$

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \\ 1 & x_3 & x_3^2 & x_3^3 \\ 1 & x_4 & x_4^2 & x_4^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

การหาค่าของ $a_0, a_1, \mathrm{a}_2, a_3$ สามารถใช้วิธีการทางเมทริกซ์ที่ได้เรียนมาในบทที่ 4

ตัวอย่างที่ 6.1 จากข้อมูลในตารางที่ E6.1-1 ดังต่อไปนี้

ตารางที่ E6.1-1 ข้อมูลประกอบตัวอย่างที่ 6.1

x	300	400	500
y	0.616	0.525	0.457

จงหาค่าของ y เมื่อ x มีค่าเท่ากับ 350 โดยใช้สมการพหุนามในการประมาณค่าในช่วง

วิธีทำ

จากข้อมูลพบว่า n มีค่าเท่ากับ 2 ดังนั้นสามารถเขียนเป็นสมการพหุนามได้ดังสมการ (E6.1-1)

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \tag{E6.1-1}$$

เมื่อนำข้อมูลจากตารางมาแทนค่าลงในสมการ (E6.1-1) ได้ดังสมการต่อไปนี้

$$0.616 = a_0 + (300)a_1 + (300)^2 a_2$$

$0.525 = a_0 + (400)a_1 + (400)^2 a_2$

$0.457 = a_0 + (500)a_1 + (500)^2 a_2$

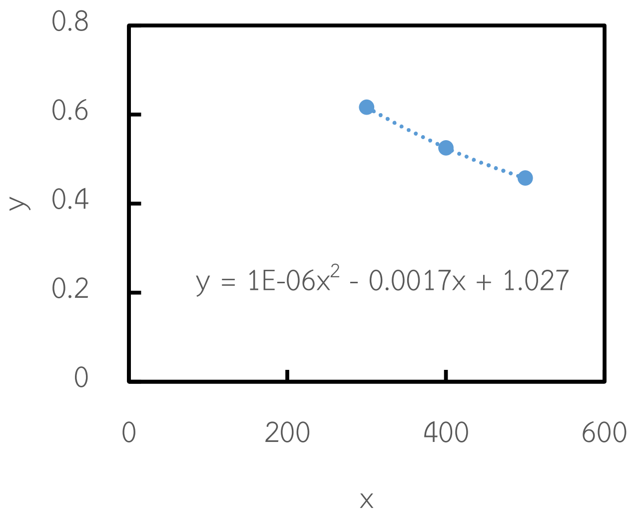
สามารถเขียนให้อยู่ในรูปเมทริกซ์ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 300 & 300^2 \\ 1 & 400 & 400^2 \\ 1 & 500 & 500^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.616 \\ 0.525 \\ 0.457 \end{bmatrix}$$

และค่า a_0 a_1 และ a_2 มีค่าเท่ากับ 1.027 -1.715x10^{-3} และ 1.15x10^{-6} ตามลำดับ และแทนค่าลงในสมการ (E6.1-1) ได้เป็นสมการ (E6.1-2)

$$y = 1.027 - 1.715x10^{-3}x + 1.15x10^{-6}x^2 \qquad \text{(E6.1-1)}$$

เมื่อแทนค่า x เท่ากับ 300 จะได้ค่า y เท่ากับ 0.05676



รูปที่ 6.1 การประมาณค่าในช่วงด้วยสมการพหุนาม $y = 1.027 - 1.715x10^{-3}x + 1.15x10^{-6}x^2$

ค่าของ y เท่ากับ 0.5705 เมื่อ x เท่ากับ 350 โดยการประมาณค่าในช่วงด้วยสมการพหุนามจากสมการ (E6.1-1)

6.3 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของนิวตัน

การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของนิวตัน (Newton's interpolating polynomial) เป็นการประมาณค่าในช่วงที่นิยมใช้ เนื่องจากเป็นการเลือกช่วงที่ตำแหน่งของข้อมูลที่ต้องการหาโดยไม่จำเป็นต้องหาด้วยสมการพหุนามกำลัง n สำหรับข้อมูลจำนวน $n+1$ ข้อมูล

6.3.1 การประมาณค่าในช่วงด้วยสมการเส้นตรงของนิวตัน

การประมาณค่าในช่วงด้วยสมการเส้นตรงของนิวตัน (Linear Interpolation) เป็นการประมาณค่าโดยอาศัยสมการเส้นตรง ดังสมการ (6.3) ซึ่งเป็นการหาสมการเส้นตรงโดยปกติ สำหรับการหาค่าคงที่ในสมการ (6.3) จะเป็นต้องการข้อมูลเพียง 2 จุด ดังรูปที่ 6.2

$$f_1(x) = b_1 + b_2\left(x - x_1\right) \tag{6.3}$$

เมื่อแทนข้อมูลลงในสมการ (6.3)

$$f(x_1) = b_1 + b_2\left(x_1 - x_1\right)$$

$$f(x_2) = b_1 + b_2\left(x_2 - x_1\right)$$

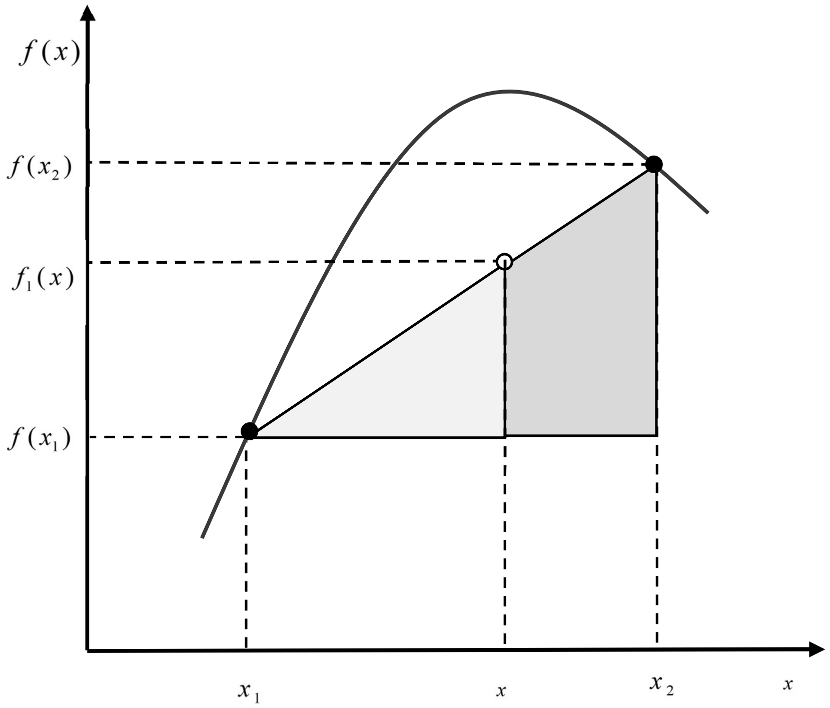
ดังนั้น

$$b_1 = f_1(x)$$

$$b_2 = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

ดังนั้นสมการ (6.3) ได้เป็นสมการ (6.4)

$$f_1(x) = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}\left(x - x_1\right) \tag{6.4}$$



รูปที่ 6.2 หลักการการประมาณค่าในช่วงแบบเส้นตรงของนิวตัน

ที่มา: Chapra (2010)

ตัวอย่างที่ 6.2 จากข้อมูลในตารางที่ E6.2-1 ดังต่อไปนี้

ตารางที่ E6.2-1 ข้อมูลประกอบตัวอย่างที่ 6.2

x	300	400	500
y	0.616	0.525	0.457

จงหาค่าของ y เมื่อ x เท่ากับ 350 โดยการประมาณค่าในช่วงด้วยสมการเส้นตรงของนิวตัน

วิธีทำ

จากสมการ (6.4) และเนื่องจากต้องการประมาณค่า y ที่ x เท่ากับ 350 ดังนั้นจำเป็นต้องใช้ข้อมูลจำนวน 2 ข้อมูล ดังนั้นเลือกค่าของ x เท่ากับ 300 และ 400

$$f_1(x) = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1)$$

$$f_1(x) = 0.616 + \frac{0.525 - 0.616}{400 - 300}(x - 300) = 0.616 - 9.1x10^{-4}(x - 300)$$

เมื่อแทนค่า x เท่ากับ 350 จะได้ค่า y ดังนี้

$$f_1(x) = 0.616 - 9.1x10^{-4}(350 - 300) = 0.616 - 0.0455 = 0.5705$$

ค่าของ y เท่ากับ 0.5705 เมื่อ x เท่ากับ 350 โดยการประมาณค่าในช่วงด้วยสมการเส้นตรงของนิวตัน

6.3.2 การประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสองของนิวตัน

การประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสองของนิวตัน (Quadratic Interpolation) เป็นการประมาณค่าโดยอาศัยพหุนามกำลังสอง ดังนั้นวิธีนี้ต้องการข้อมูลเพียง 3 จุด ก็สามารถเขียนให้อยู่ในรูปทั่วไปดังสมการ (6.5)

$$f_2(x) = b_1 + b_2(x - x_1) + b_3(x - x_1)(x - x_2) \qquad (6.5)$$

แทนค่าที่จุด $(x_1, f(x_1))$ เพื่อหาค่าของ b_1

$f(x_1) = b_1 + b_2(x_1 - x_1) + b_3(x_1 - x_1)(x_1 - x_2)$ หรือ $b_1 = f(x_1)$

แทนค่าที่จุด $(x_2, f(x_2))$ เพื่อหาค่าของ b_2

$f(x_2) = f(x_1) + b_2(x_2 - x_1) + b_3(x_2 - x_1)(x_2 - x_2)$ หรือ $b_2 = \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$

แทนค่าที่จุด $(x_3, f(x_3))$ เพื่อหาค่าของ b_3

$f(x_3) = f(x_1) + \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x_3 - x_1) + b_3(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)$ หรือ

$$b_3 = \frac{\dfrac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} - \dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}}{x_3 - x_1}$$

ตัวอย่าง 6.3 จากข้อมูลดังในตารางที่ E6.3-1 จงหาค่าของ y เมื่อ x เท่ากับ 350 โดยใช้การประมาณค่าในช่วงด้วยสมการพหุนามกำลังสองของนิวตัน

x	300	400	500
y	0.616	0.525	0.457

วิธีทำ

สมการพหุนามกำลังสองของนิวตันดังสมการ (6.5) และเนื่องจากต้องการประมาณค่า y ที่ x เท่ากับ 350 ดังนั้นจำเป็นต้องใช้ข้อมูลจำนวน 3 จุด สำหรับการหาค่าคงที่ที่มีในสมการ (E6.3-1) ดังนั้นใช้ข้อมูลที่ค่า x เท่ากับ 300 400 และ 500

$$f_2(x)=b_1+b_2\left(x-x_1\right)+b_3\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right) \quad \text{(E6.3-1)}$$

แทนค่าสมการหาค่า b_1 b_2 และ b_3

$$b_1=f(x_1)=0.616$$

$$b_2=\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}=\frac{0.525-0.616}{400-300}=-9.1x10^{-4}$$

$$b_3=\frac{\dfrac{f(x_3)-f(x_2)}{x_3-x_2}-\dfrac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1}}{x_3-x_1}=\frac{\dfrac{0.457-0.525}{500-400}-\dfrac{0.525-0616}{400-300}}{500-300}=1.15x10^{-6}$$

และแทนค่า b_1 b_2 และ b_3 ลงในสมการ (E6.3-1) และค่า $x_1=300$ และ $x_2=400$ ได้เป็นสมการ (E6.3-2)

$$f_2(x)=0.616-9.1x10^{-4}\left(x-300\right)+1.15x10^{-6}\left(x-300\right)\left(x-400\right)$$

เมื่อแทนค่า x เท่ากับ 350 จะได้ค่า y ดังนี้

$$f_2(x)=0.616-9.1x10^{-4}\left(350-300\right)+1.15x10^{-6}\left(350-300\right)\left(350-400\right)=0.5676$$

ค่าของ y เท่ากับ 0.5676 เมื่อ x เท่ากับ 350 โดยการประมาณค่าในช่วงด้วยสมการพหุนามกำลังสองของนิวตัน

6.3.3 การประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลัง $n-1$ ของนิวตัน

การประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลัง $n-1$ เป็นการประมาณค่าโดยอาศัยพหุนามกำลัง $n-1$ ดังนั้นวิธีนี้ต้องการข้อมูลเพียง n จุด ก็สามารถเขียนให้อยู่ในรูปทั่วไปคือ

$$f_{n-1}(x)=b_1+b_2\left(x-x_1\right)+b_3\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right)+\ldots+b_n\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right)\cdots\left(x-x_{n-1}\right) \quad (6.3)$$

b_1 b_2 ถึง b_n สามารถหาโดยการแทนค่าดังนี้

$$b_1=f(x_1)$$

$$b_2=f\left[x_2,x_1\right]$$

$$b_3=f\left[x_3,x_2,x_1\right]$$

จนกระทั่ง

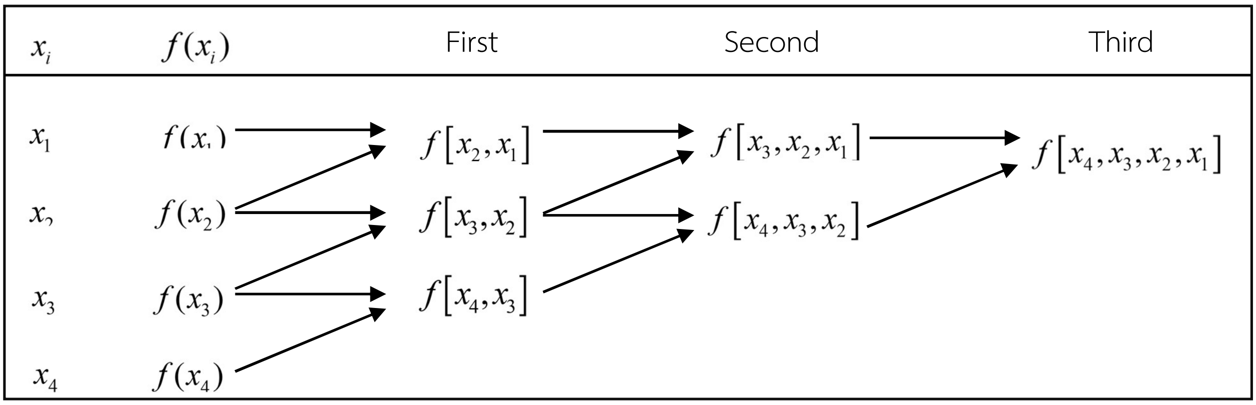
$b_n = f\left[x_n, x_{n-1}, \ldots, x_3, x_2, x_1\right]$

เมื่อ

$$f\left[x_i, x_j\right] = \frac{f\left(x_i\right) - f\left(x_j\right)}{x_i - x_j}$$

$$f\left[x_i, x_j, x_k\right] = \frac{f\left[x_i, x_j\right] - f\left[x_j, x_k\right]}{x_i - x_k}$$

ซึ่งสามารถสรุปเป็นแผนภาพได้ดังรูปที่ 6.3



รูปที่ 6.3 สรุปการประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลัง $n-1$ ของนิวตัน

ที่มา: Chapra (2010)

ตัวอย่าง 6.4 จงหาอุณหภูมิที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L ด้วยวิธีการประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสามของนิวตัน โดยใช้ข้อมูลในตารางที่ E6.4-1

ตารางที่ E6.4-1 ความเข้มข้นของปริมาณออกซิเจนที่ละลายในน้ำทะเลที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิน้ำทะเล, °C	0	8	16	24	32
ความเข้มข้นของออกซิเจน, mg/L	14.621	11.843	9.870	8.418	7.305

วิธีทำ

เนื่องจากข้อมูลที่ต้องการทราบคืออุณหภูมิน้ำทะเลที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L ดังนั้นเพื่อให้ง่ายต่อการคำนวณจึงจัดตารางใหม่ดังตารางที่ E6.4-2

ตารางที่ E6.4-2 ตารางประกอบการคำนวณตัวอย่างที่ 6.4

ความเข้มข้นของออกซิเจน, mg/L	14.621	11.843	9.870	8.418	7.305
อุณหภูมิน้ำทะเล, °C	0	8	16	24	32

เนื่องจากต้องการทราบอุณหภูมิที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L พบว่าค่าของอุณหภูมิจะอยู่ระหว่างอุณหภูมิน้ำทะเลเป็น 8 ถึง 16 °C ด้วย วิธีการประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสามของนิวตันดังสมการ (E6.4-1) และจำเป็นต้องใช้ชุดข้อมูลจำนวน 4 จุด ซึ่งในตารางที่ E6.4-2 มีทั้งหมด 5 จุด

$$f_3(x) = b_1 + b_2\left(x-x_1\right) + b_3\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right) + b_4\left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right)\left(x-x_3\right) \tag{E6.4-1}$$

ดังนั้นชุดข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 กรณี ดังนี้

กรณีที่ 1 เลือกชุดข้อมูลที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 14.621 11.843 9.870 8.418

แทนค่าสมการหาค่า b_1 b_2 b_3 และ b_4

$$b_1 = f(x_1) = 0$$

$$b_2 = f\left[x_2, x_1\right] = \frac{f\left(x_2\right) - f\left(x_1\right)}{x_2 - x_1} = \frac{8-0}{11.843-14.621} = -2.8797$$

$$b_3 = f\left[x_3, x_2, x_1\right] = \frac{f\left[x_3, x_2\right] - f\left[x_2, x_1\right]}{x_3 - x_1} = \frac{-4.0547+2.8797}{9.87-14.621} = 0.2473$$

$$b_4 = f\left[x_4, x_3, x_2, x_1\right] = \frac{f\left[x_4, x_3, x_2\right] - f\left[x_3, x_2, x_1\right]}{x_4 - x_1} = \frac{0.4248-0.2473}{8.418-14.621} = -0.028615$$

และแทนค่า b_1 b_2 b_3 และ b_4 ลงในสมการ (E6.4-1) ได้เป็นสมการ (E6.4-2)

$$\begin{aligned} f_3(x) &= 0 - 2.8797\left(x-14.621\right) + (0.2473)\left(x-14.621\right)\left(x-11.843\right) \\ &+(-0.028615)\left(x-11.843\right)\left(x-14.621\right)\left(x-9.870\right) \end{aligned} \tag{E6.4-2}$$

เมื่อแทนค่าความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10 mg/L จะได้อุณหภูมิน้ำทะเลดังนี้

$$\begin{aligned} f_3(x) &= 0 - 2.8797\left(10-14.621\right) + (0.2473)\left(10-14.621\right)\left(10-11.843\right) \\ &+(-0.028615)\left(10-11.843\right)\left(10-14.621\right)\left(10-9.870\right) \end{aligned}$$

$$f_3(x) = 15.3815 \text{ °C}$$

กรณีที่ 2 เลือกชุดข้อมูลที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 11.843 9.870 8.418 และ 7.305

แทนค่าสมการหาค่า b_1 b_2 b_3 และ b_4

$$b_1 = f(x_1) = 8$$

$$b_2 = f\left[x_2, x_1\right] = \frac{f\left(x_2\right) - f\left(x_1\right)}{x_2 - x_1} = \frac{16-8}{9.870-11.843} = -4.0547$$

$$b_3 = f\left[x_3, x_2, x_1\right] = \frac{f\left[x_3, x_2\right] - f\left[x_2, x_1\right]}{x_3 - x_1} = \frac{-5.5096+4.0547}{8.418-11.843} = 0.4248$$

$$b_4 = f\left[x_4, x_3, x_2, x_1\right] = \frac{f\left[x_4, x_3, x_2\right] - f\left[x_3, x_2, x_1\right]}{x_4 - x_1} = \frac{0.6543-0.4248}{7.305-11.843} = -0.0506$$

และแทนค่า b_1 b_2 b_3 และ b_4 ลงในสมการ (E6.3-1) ได้เป็นสมการ (E6.3-3)

$$f_3(x) = 8 - 4.0547(x - 11.843) + (0.4248)(x - 11.843)(x - 9.870) +$$
$$(-0.0506)(x - 11.843)(x - 9.870)(x - 8.418)$$

เมื่อแทนค่าความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10 mg/L จะได้อุณหภูมิน้ำทะเลดังนี้

$$f_3(x) = 8 - 4.0547(10 - 11.843) + (0.4248)(10 - 11.843)(10 - 9.870) +$$
$$(-0.0506)(10 - 11.843)(10 - 9.870)(10 - 8.418)$$
$$f_3(x) = 15.3902 \ ^{\circ}\mathrm{C}$$

จากการคำนวณทั้งสองกรณีสามารถสรุปได้ดังตารางที่ E6.3-3

ตารางที่ E6.3-3 สรุปผลกาณคำหาค่าคงที่ในด้วยวิธีการประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสามของนิวตันทั้งสองกรณี

x_i	$f(x_i)$	First	Second	Third
14.621	0	-2.8797	0.2473	-0.0286
11.843	8	-4.0547	0.4248	-0.0506
9.870	16	-5.5096	0.6543	
8.418	24	-7.1878		
7.305	32			

อุณหภูมิที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L ด้วยวิธีการประมาณค่าในช่วงแบบสมการพหุนามกำลังสามของนิวตัน คือ 15.3815 °C สำหรับกรณีใช้ข้อมูล 3 จุดแรก และ 15.3902 °C สำหรับกรณีใช้ข้อมูล 3 จุดถัดมา

6.4 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของลากรานจ์

การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามของลากรานจ์ (Lagrange Interpolating Polynomial) มีสูตรทั่วไปดังสมการ (6.5)

$$f_n(\mathrm{x}) = \sum_{i=0}^{n} Li(x) f(\mathrm{x_i}) \tag{6.5}$$

เมื่อ $L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq 1}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$

6.4.1 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการเส้นตรงของลากรองจ์

การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการเส้นตรงของลากรองจ์เมื่อ n เท่ากับ 1 ดังนั้นเมื่อแทนค่าลงในสมการ (6.5) จะได้เป็นสมการ (6.6)

$$f_1(x) = L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) \tag{6.6}$$

ในรูปที่ 6.5 แสดงหลักการหาการประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการเส้นตรงของลากรองจ์ จากรูปที่ 6.5 พบว่า $L_1(x)$ เท่ากับ 1 ที่จุด x เท่ากับ x_1 และ $L_1(x)$ เท่ากับ 0 ที่จุด x เท่ากับ x_2 จากรูปแบบสมการเส้นตรง $L_1(x) = mx + c$ เมื่แทนค่า $L_1(x)$ เท่ากับ 1 ที่จุด x เท่ากับ x_1 และ $L_1(x)$ เท่ากับ 0 จะได้เป็น $1 = mx_1 + c$ และ $0 = mx_2 + c$ เมื่อแก้สมการเพื่อหาค่า m และ c จะได้ดังนี้

$m = \dfrac{1}{x_1 - x_2}$ และ $c = -\dfrac{x_2}{x_1 - x_2}$ ดังนั้นเมื่อแทนค่า m และ c จะได้ดังสมการ (6.7)

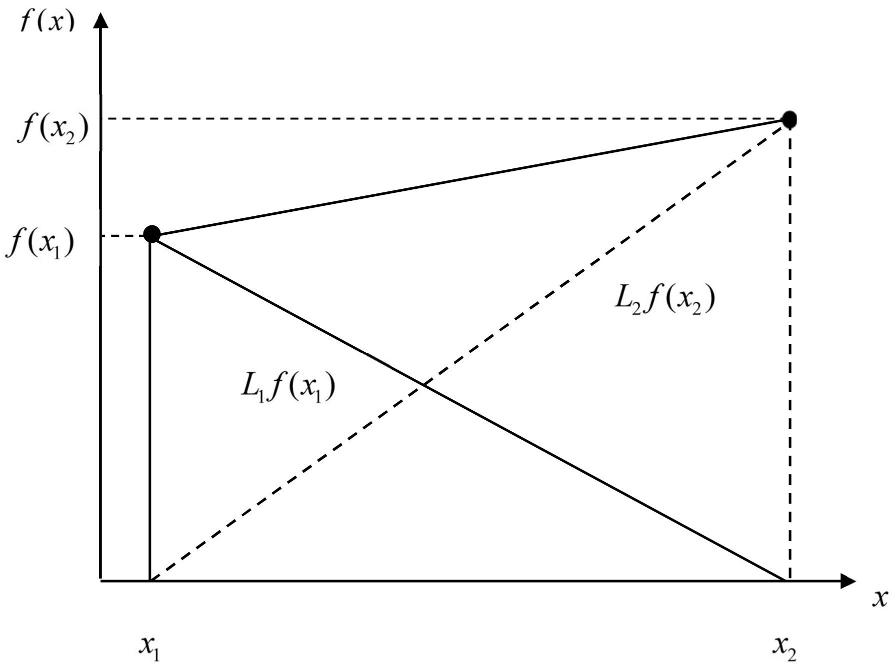
$$L_1(x) = \frac{x}{x_1 - x_2} - \frac{x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \tag{6.7}$$

ในขณะที่ $L_2(x)$ เท่ากับ 0 ที่จุด x เท่ากับ x_1 และ $L_2(x)$ เท่ากับ 1 ที่จุด x เท่ากับ x_2 ซึ่งสามารถพิสูจน์เช่นเดียวกับ $L_1(x)$ ดังนั้น $L_2(x)$ ที่จุด x ใดๆ สามารถเชียนได้ดังสมการ (6.8)

$$L_2(x) = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

ดังนั้นสมการ (6.6) สามารถเขียนใหม่ได้เป็นสมการ (6.9)

$$f_1(x) = L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1) + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2) \tag{6.9}$$



รูปที่ 6.5 รูปประกอบหลักการหาค่า $L_1(x)$ และ $L_2(x)$
ที่มา: Chapra (2010)

6.4.2 การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์

สมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์สามารถเขียนในรูปทั่วไปได้ดังนี้

$$f_2(x) = L_1 f(x_1) + L_2 f(x_2) + L_3 f(x_3)$$

เมื่อ L_1 L_2 และ L_3 เป็นค่าสัมประสิทธิ์การถ่วงน้ำหนักเชิงเส้นตรงของลากรองจ์ ดังนั้น

$$L_1 = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$L_2 = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$L_3 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

ตัวอย่าง 6.5 จงหาอุณหภูมิที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L ด้วยวิธีสมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์ โดยใช้ข้อมูลในตารางที่ E6.5-1

ตารางที่ E6.5-1 ความเข้มข้นของปริมาณออกซิเจนที่ละลายในน้ำทะเลที่อุณหภูมิต่างๆ

อุณหภูมิน้ำทะเล, °C	0	8	16	24	32
ความเข้มข้น O_2, mg/L	14.621	11.843	9.870	8.418	7.305

วิธีทำ

การประมาณค่าในช่วงด้วยวิธีสมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์ดังสมการ (E6.5-1)

$$f_2(x) = L_1 f(x_1) + L_2 f(x_2) + L_3 f(x_3) \qquad \text{(E6.5-1)}$$

เนื่องจากจุดที่ต้องการทราบของมูลคืออุณหภูมิน้ำทะเลที่ความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 10.000 mg/L ซึ่งจะเห็นว่าเป็นจุดที่อยู่ระหว่างความเข้มข้นของออกซิเจนเป็น 11.843 และ 9.870 mg/L แต่เนื่องจากการประมาณค่าด้วยสมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์จำเป็นต้องใช้ข้อมูลประกอบการคำนวณ 3 จุด ดังนั้นสามารถแบ่งได้ออกเป็น 2 กรณีคือ

1. เลือกจุดที่ความเข้มข้นออกซิเจนเป็น 14.621 11.843 และ 9.870 mg/L ตามลำดับ

ความเข้มข้น O_2, mg/L	14.621	11.843	9.870
อุณหภูมิน้ำทะเล, °C	0	8	16

$$L_1 = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{(x-11.843)(x-9.870)}{(14.621-11.843)(14.621-11.843)}$$

$$L_2 = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{(x-14.621)(x-9.870)}{(11.843-14.621)(11.843-9.870)}$$

$$L_3 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{(x-14.621)(x-11.843)}{(9.870-14.621)(9.870-11.843)}$$

เมื่อแทน ความเข้มข้นออกซิเจนเป็น 10 mg/L

$$L_1 = \frac{(10.000-11.843)(10.000-9.870)}{(14.621-11.843)(14.621-9.870)} = -0.0179$$

$$L_2 = \frac{(10.000-14.621)(10.000-9.870)}{(11.843-14.621)(11.843-9.870)} = 0.1096$$

$$L_3 = \frac{(10.000-14.621)(10-11.843)}{(9.870-14.621)(9.870-11.843)} = 0.9086$$

เมื่อ $f(x_1)=0$ $f(x_2)=8$ และ $f(x_3)=16$ แทนค่าต่างๆ

$$f_2(x) = (-0.0179)(0) + (0.1096)(8) + (0.9086)(16) = 15.14$$

ดังนั้น อุณหภูมิเป็น 15.41 °C จะมีความเข้มข้นออกซิเจนที่ละลายในน้ำทะเลเท่ากับ 10 mg/L

2. เลือกจุดที่ความเข้มข้นออกซิเจนเป็น 11.843 9.870 และ 8.418 mg/L ตามลำดับ

ความเข้มข้น O_2, mg/L	11.843	9.870	8.418
อุณหภูมิน้ำทะเล, °C	8	16	24

$$L_1 = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{(x-9.870)(x-8.418)}{(11.843-9.870)(11.843-8.418)}$$

$$L_2 = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{(x-11.843)(x-8.418)}{(9.870-11.843)(9.870-8.418)}$$

$$L_3 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{(x-11.843)(x-9.870)}{(8.418-11.843)(8.418-9.870)}$$

เมื่อแทน ความเข้มข้นออกซิเจนเป็น 10 mg/L

$$L_1 = \frac{(10.000-9.870)(10.000-8.418)}{(11.843-9.870)(11.843-8.418)} = 0.0304$$

$$L_2 = \frac{(10.000-11.843)(10.000-8.418)}{(9.870-11.843)(9.870-8.418)} = 1.0177$$

$$L_3 = \frac{(10.000-11.843)(10-9.870)}{(8.418-11.843)(8.418-9.870)} = -0.0481$$

เมื่อ $f(x_1)=8$ $f(x_2)=16$ และ $f(x_3)=24$ และแทนค่าต่างจะได้ดังนี้

$$f_2(x) = (0.0304)(8) + (1.0177)(16) + (-0.0481)(24) = 15.372$$

ดังนั้น ความเข้มข้นออกซิเจนที่ละลายในน้ำทะเลเท่ากับ 10 mg/L จะมีอุณหภูมิเป็น 15.372 °C

6.5 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline

การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline เป็นการสร้างสมการพหุนามโดยอาศัยข้อมูลทั้งหมดมาสร้างเป็นสมการ ซึ่งในแต่ละช่วงจะมีสมการพหุนาม 1 สมการ ดังนั้นถ้ามีข้อมูลจำนวน n ข้อมูล จะมีสมการพหุนาม n-1 สมการ

6.5.1 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการเส้นตรง

การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการเส้นตรง โดยแต่ละจุดของข้อมูลเชื่อมกันเป็นเส้นตรง ซึ่งสามารถเขียนแทนด้วยสมการดังต่อไปนี้

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i)$$

เมื่อ $a_i = f(x_i)$ และ $b_i = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$ ดังนั้น

$$S_i(x) = f(x_i) + \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i)$$

ตัวอย่างที่ 6.6 จากข้อมูลในตารางที่ E6.6-1 จงหาค่าของ y เมื่อค่าของ x เท่ากับ 350 ด้วย Spline แบบเส้นตรงในการประมาณค่าในช่วง

ตารางที่ E6.6-1 ข้อมูลประกอบตัวอย่างที่ 6.6

x	300	400	500
y	0.616	0.525	0.457

วิธีทำ

เนื่องจากมีจำนวนข้อมูล 3 จุด ดังนั้นจำนวนสมการเส้นตรงจะมีทั้งหมด 2 สมการ คือ

เมื่อ $300 \le x \le 400$

$$S_1(x) = f(x_1) + \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}(x - x_1) = 300 + \frac{0.525 - 0.616}{400 - 300}(x - 300) =$$

เมื่อ $400 \le x \le 500$

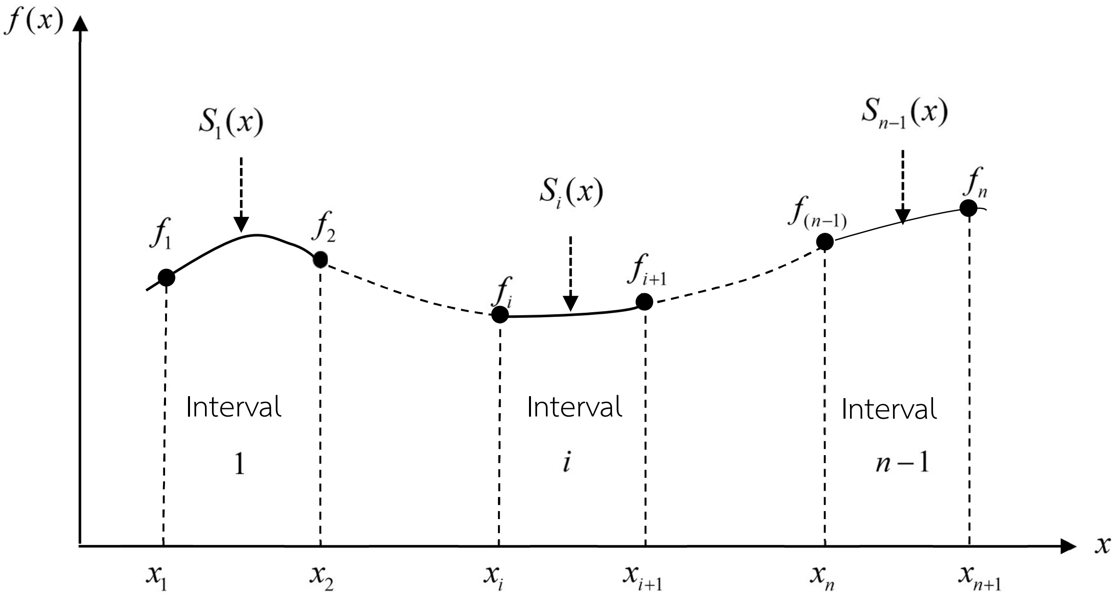
$$S_2(x) = f(x_2) + \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2}(x - x_2) = 400 + \frac{0.457 - 0.525}{500 - 400}(x - 400) =$$

เนื่องจากต้องการหาค่าของ y ที่ x เท่ากับ 350 ดังนั้นจำเป็นต้องใช้สมการของ $S_1(x)$

6.5.2 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการพหุนามกำลังสอง

การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการพหุนามกำลังสอง โดยแต่ละจุดของข้อมูลเชื่อมกันเป็นสมการพหุนามกำลังสอง ซึ่งสามารถเขียนแทนด้วยสมการ (6.11) ดังรูปที่ 6.6

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 \qquad (6.10)$$



รูปที่ 6.6 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline แบบสมการกำลังสอง
ที่มา: Chapra (2010)

จากรูปที่ 6.6 เมื่อมีจำนวนข้อมูล n จุด ดังนั้นจะมีจำนวนช่วงเท่ากับ $n-1$ ซึ่งแต่ละช่วงจะต้องมีสมการพหุนามกำลังสอง 1 สมการ ดังนั้นจำนวนสมการพหุนามทั้งหมด $n-1$ สมการ จากสมการ (6.10) จะเห็นว่าใน 1 สมการ มีจำนวนตัวแปร 3 ตัวแปร คือ a b และ c ทำให้มีจำนวนตัวแปรทั้งหมดเท่ากับ $3(n-1)$ ตัวแปร เพื่อหาค่าของตัวแปรทั้งหมดได้ดังนี้

ขั้นที่ 1 ฟังก์ชันจะต้องผ่านทุกจุด และมีความต่อเนื่องกัน
เมื่อแทนจุด $(x_i, f(x_i))$ ลงในสมการ (6.10)

$$f(x_i) = a_i + b_i(x_i - x_i) + c_i(x_i - x_i)^2$$

ดังนั้น $a_i = f(x_i)$ ซึ่งเมื่อแทนค่าลงในสมการ (6.10) จะทำให้สมการกลายเป็น (6.11)

$$S_i(x) = f(x_i) + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 \qquad (6.11)$$

ในขั้นที่ 1 จะทำให้จำนวนตัวแปรลดลงเหลือ $2(n-1)$

ขั้นที่ 2 ฟังก์ชันที่อยู่ติดกันจะต้องมีค่าเท่ากันที่จุดเชื่อมภายใน (Interior knots)
ดังนั้น $S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$ ดังสมการ (6.12)

$$f(x_i) + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 = f(x_{i+1}) + b_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + c_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^2$$

$$f(x_i) + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 = f(x_{i+1}) \qquad (6.12)$$

ซึ่งในขั้นนี้จะมีเงื่อนไขทั้งหมด $n-1$ ดังนั้นจำนวนเงื่อนไขจะเหลือเป็น $2(n-1) - n - 1 = n - 1$ เงื่อนไข
สมมุติให้ $h_i = x_{i+1} - x_i$ ดังนั้นสามารถเขียนสมการ (6.12) เป็นสมการ (6.13)

$$f(x_i)+b_ih_i+c_ih_i^2=f(x_{i+1}) \tag{6.13}$$

ขั้นที่ 3 อนุพันธ์อันดับ 1 ของฟังก์ชัน ที่อยู่ติดกันต้องเท่ากันที่จุดเชื่อมภายใน $S'_i(x)=S'_{i+1}(x)$
ดังนั้น $S'_i(x)=b_i+2c_i(x-x_i)$ ทำให้ $S'_i(x_{i+1})=S'_{i+1}(x_{i+1})$ ดังสมการ (6.14)

$$b_i+2c_i(x_{i+1}-x_i)=b_{i+1}+2c_{i+1}(x_{i+1}-x_{i+1})$$

$$b_i+2c_i(x_{i+1}-x_i)=b_{i+1} \text{ หรือ } b_i+2c_ih_i=b_{i+1} \tag{6.14}$$

ซึ่งในขั้นนี้จะมีเงื่อนไขทั้งหมด $n-2$ ดังนั้นจำนวนเงื่อนไขจะเหลือเป็น $n-1-(n-2)=1$ เงื่อนไข

ขั้นที่ 4 สมมุติให้ค่าคงที่ $c_1=0$ ซึ่งจะทำให้ฟังก์ชัน $S_1(x)$ เป็นสมการเส้นตรง

ตัวอย่างที่ 6.7 ในการวัดอุณหภูมิตามระยะทางของการระบายความร้อนของแผ่นครีบรูปร่างสี่เหลี่ยมให้ผลการทดลองดังตารางที่ E6.7-1 จงหาระยะทางที่มีอุณหภูมิเป็น 400 °C ด้วยวิธีการประมาณค่าในช่วงด้วย Spline แบบสมการกำลังสอง

ตารางที่ E6.7-1 ผลการทดลองการวัดอุณหภูมิตามระยะทางของการระบายความร้อนของแผ่นครีบรูปร่างสี่เหลี่ยม

x, m	0.025	0.050	0.075	0.100
T, °C	461	425	393	363

วิธีทำ

เนื่องจากโจทย์กำหนดหาระยะทางที่มีอุณหภูมิเป็น 400 °C ดังนั้นจำเป็นต้องจัดตารางใหม่ดังตารางที่ E6.7-2

ตารางที่ E6.7-2 ตารางประกอบการคำนวณตัวอย่าง 6.7

T, °C	461	425	393	363
x, m	0.025	0.050	0.075	0.100

เนื่องจากจำนวนข้อมูลมีทั้งหมด 4 จุด ดังนั้นจะมีจำนวนสมการทั้งหมด 3 สมการดังนี้

$$S_1(T)=a_1+b_1(T-T_1)+c_1(T-T_1)^2=a_1+b_1(T-461)+c_1(T-461)^2$$

$$S_2(T)=a_2+b_2(T-T_2)+c_2(T-T_2)^2=a_2+b_2(T-425)+c_2(T-425)^2$$

$$S_3(T)=a_3+b_3(T-T_3)+c_3(T-T_3)^2=a_3+b_3(T-393)+c_3(T-393)^2$$

ขั้นที่ 1. เนื่องจาก $a_i=f_i(x)$
ดังนั้น $a_1=f(x_1)=0.025$

$$a_2 = f(x_2) = 0.050$$
$$a_3 = f(x_3) = 0.075$$

ดังนั้นได้เป็นสมการใหม่คือ

$$S_1(T) = a_1 + b_1(T-461) + c_1(T-461)^2 = 0.025 + b_1(T-461) + c_1(T-461)^2$$
$$S_2(T) = a_2 + b_2(T-425) + c_2(T-425)^2 = 0.050 + b_2(T-425) + c_2(T-425)^2$$
$$S_3(T) = a_3 + b_3(T-393) + c_3(T-393)^2 = 0.075 + b_3(T-393) + c_3(T-393)^2$$

ขั้นที่ 2

จาก $f(x_i) + b_i h_i + c_i h_i^2 = f(x_{i+1})$

เมื่อ

$h_1 = 425 - 461 = -36$ ดังนั้น $0.025 + b_1(-36) + c_1(-36)^2 = 0.050$

$h_2 = 393 - 425 = -32$ ดังนั้น $0.050 + b_2(-32) + c_2(-32)^2 = 0.075$

$h_3 = 363 - 393 = -30$ ดังนั้น $0.075 + b_3(-30) + c_3(-30)^2 = 0.100$

ขั้นที่ 3

จาก $b_i + 2c_i h_i = b_{i+1}$

เมื่อ

$h_1 = -36$ ดังนั้น $b_1 + 2c_1(-36) = b_2$

$h_2 = -32$ ดังนั้น $b_2 + 2c_2(-32) = b_3$

ขั้นที่ 4 เมื่อ $c_1 = 0$ ดังนั้น

$$S_1(T) = 0.25 + b_1(T-461)$$

แทนค่าจุด $(425, 0.050)$ ลงในสมการเพื่อหาค่า b_1

$$0.050 = 0.25 + b_1(425-461)$$
$$b_1 = \frac{0.050 - 0.025}{425 - 461} = -6.944x10^{-4}$$

ดังนั้นฟังก์ชัน $S_1(T) = 0.25 - 6.944x10^{-4}(T-461)$

จาก $b_1 + 2c_1(-36) = b_2$ หรือ $b_2 = b_1 = -6.944x10^{-4}$

จาก

$0.050 + b_2(-32) + c_2(-32)^2 = 0.075$ หรือ $-32b_2 + 1024c_2 = 0.025$

ดังนั้น $c_2 = \dfrac{0.025 + 32b_2}{1024} = 4.611x10^{-5}$

ดังนั้น ฟังก์ชัน $S_2(T) = 0.050 - 6.944x10^{-4}(T-425) + 4.611x10^{-5}(T-425)^2$

จาก $b_2 + 2c_2(-32) = b_3$ ดังนั้น

$b_3 = b_2 - 64c_2 = -6.944x10^{-4} - 64x4.611x10^{-5} = -3.645x10^{-3}$

และ

$-30b_3 + 900c_3 = 0.025$ ดังนั้น $c_3 = \dfrac{0.025 + 30b_3}{900} = \dfrac{0.025 + 30x(-3.645x10^{-3})}{900} = -9.372x10^{-5}$

ดังนั้น ฟังก์ชัน $S_3(T) = 0.075 - 3.645x10^{-3}(T-393) - 9.372x10^{-5}(T-393)^2$

เนื่องจากระยะทางที่อุรหภูมิ 400 °C ดังนั้นเลือกใช้ฟังก์ชัน $S_2(T)$ ในการคำนวณ

$S_2(T) = 0.050 - 6.944x10^{-4}(400-425) + 4.611x10^{-5}(400-425)^2 = 0.0961725$

6.5.3 การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการพหุนามกำลังสาม

การประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการพหุนามกำลังสาม มีรูปแบบสมการดังสมการ (6.15)

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + c_i(x - x_i)^2 + d_i(x - x_i)^3 \tag{6.15}$$

ซึ่งมีหลักการเหมือนการประมาณค่าในช่วงด้วย Spline แบบสมการพหุนามกำลังสอง จำนวนตัวแปรที่ต้องหาคือ $4(n-1)$ และมีขั้นตอนในการหาตัวแปรต่างๆ ดังนี้

ขั้นที่ 1 ฟังก์ชันจะต้องผ่านทุกจุด และมีความต่อเนื่องกัน

เมื่อแทนจุด $(x_i, f(x_i))$ ลงในสมการ (6.15)

$f(x_i) = a_i + b_i(x_i - x_i) + c_i(x_i - x_i)^2 + d_i(x_i - x_i)^3$

ดังนั้น $a_i = f(x_i)$ ซึ่งเมื่อแทนค่าลงในสมการ (6.15) จะทำให้สมการกลายเป็น (6.16)

$$S_i(x) = f(x_i) + b_i(x_i - x_i) + c_i(x_i - x_i)^2 + d_i(x_i - x_i)^3 \tag{6.16}$$

ในขั้นที่ 1 จะทำให้จำนวนตัวแปรลดลงเหลือ $3(n-1)$

ขั้นที่ 2 ฟังก์ชันที่อยู่ติดกันจะต้องมีค่าเท่ากันที่จุดเชื่อมภายใน (Interior knots)

ดังนั้น $S_i(x_{i+1}) = S_{i+1}(x_{i+1})$ ดังสมการ (6.17)

$$f(x_i) + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3$$
$$= f(x_{i+1}) + b_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + c_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^2 + d_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^3$$

$$f(x_i) + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i(x_{i+1} - x_i)^2 + d_i(x_{i+1} - x_i)^3 = f(x_{i+1}) \tag{6.17}$$

ซึ่งในขั้นนี้จะมีเงื่อนไขทั้งหมด $n-1$ ดังนั้นจำนวนเงื่อนไขจะเหลือเป็น $3(n-1)-(n-1) = 2(n-1)$ เงื่อนไข

สมมุติให้ $h_i = x_{i+1} - x_i$ ดังนั้นสามารถเชียนสมการ (6.17) เป็นสมการ (6.18)

$$f(x_i) + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = f(x_{i+1}) \tag{6.18}$$

ขั้นที่ 3 อนุพันธ์อันดับ 1 ของฟังก์ชัน ที่อยู่ติดกันต้องเท่ากันที่จุดเชื่อมภายใน $S'_i(x) = S'_{i+1}(x)$
ดังนั้น $S'_i(x) = b_i + 2c_i(x - x_i) + 3d_i(x_{i+1} - x_i)^2$ ทำให้ $S'_i(x_{i+1}) = S'_{i+1}(x_{i+1})$ ดังสมการ (6.19)

$$b_i + 2c_i(x_{i+1} - x_i) + 3d_i(x_{i+1} - x_i)^2 = b_{i+1} + 2c_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1}) + 3d_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})^2$$

$$b_i + 2c_i(x_{i+1} - x_i) + 3d_i(x_{i+1} - x_i)^2 = b_{i+1} \text{ หรือ } b_i + 2c_ih_i + 3d_ih_i^2 = b_{i+1} \qquad (6.19)$$

ซึ่งในขั้นนี้จะมีเงื่อนไขทั้งหมด $n-2$ ดังนั้นจำนวนเงื่อนไขจะเหลือเป็น $2(n-1)-(n-1) = n-1$ เงื่อนไข

ขั้นที่ 4 อนุพันธ์อันดับ 2 ของฟังก์ชัน ที่อยู่ติดกันต้องเท่ากันที่จุดเชื่อมภายใน $S''_i(x) = S''_{i+1}(x)$
ดังนั้น $S''_i(x) = 2c_i + 6d_i(x_{i+1} - x_i)$ ทำให้ $S''_i(x_{i+1}) = S''_{i+1}(x_{i+1})$ ดังสมการ (6.20)

$$2c_i + 6d_i(x_{i+1} - x_i) = 2c_{i+1} + 6d_{i+1}(x_{i+1} - x_{i+1})$$

$$2c_i + 6d_i(x_{i+1} - x_i) = 2c_{i+1} \text{ หรือ } c_i + 3d_ih_i = c_{i+1} \qquad (6.20)$$

ขั้นที่ 5 กำหนดให้จุดเริ่มต้น ค่าอนุพันธ์อันดับสองเท่ากับ 0 หรือ $S''_1(x_1) = 0$

$$S''_1(x) = 2c_1 + 6d_1(x_1 - x_1) = 0$$

ดังนั้น $c_1 = 0$

ขั้นที่ 6 กำหนดให้จุดสุดท้ายเริ่มต้น ค่าอนุพันธ์อันดับสองเท่ากับ 0 หรือ กำหนดให้ $S''_{n-1}(x_n) = 0$

$$2c_{n-1} + 6d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 0 \text{ และ } 2c_{n-1} + 6d_{n-1}(x_n - x_{n-1}) = 2c_n$$

ดังนั้น $c_n = 0$

เพื่อหาค่าของ c_i

จาก $c_i + 3d_ih_i = c_{i+1}$ หรือ $d_i = \dfrac{(c_{i+1} - c_i)}{3h_i}$

แทนค่าลงในสมการ $f(x_i) + b_ih_i + c_ih_i^2 + d_ih_i^3 = f(x_{i+1})$

$$f(x_i) + b_ih_i + c_ih_i^2 + \frac{(c_{i+1} - c_i)}{3h_i}h_i^3 = f(x_{i+1})$$

$$f(x_i) + b_ih_i + \left(c_{i+1} + 2c_i\right)\frac{h_i^2}{3} = f(x_{i+1})$$

และจาก

$$b_i + 2c_ih_i + 3d_ih_i^2 = b_{i+1}$$

แทนค่า $d_i = \left(c_{i+1} - c_i\right)/3h_i$

$$b_i + 2c_ih_i + 3\frac{(c_{i+1} - c_i)}{3h_i}h_i^2 = b_{i+1}$$

ได้เป็น $b_i + 2c_ih_i + \left(c_{i+1} - c_i\right)h_i = b_{i+1}$

$$b_i + \left(c_{i+1} + c_i\right) h_i = b_{i+1}$$

ดังนั้น

$$b_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i} - \frac{h_i}{3}\left(2c_i + c_{i+1}\right)$$

ดังนั้น

$$b_{i-1} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_{i-1}} - \frac{h_i}{3}\left(2c_{i-1} + c_i\right)$$

และ

$$b_i = b_{i-1} + h_{i-1}\left(c_{i-1} + c_i\right)$$

$$h_{i-1}c_{i-1} + 2\left(h_{i-1} - h_i\right)c_i + h_i c_{i+1} = 3\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i+1})}{h_i} - 3\frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h_{i-1}}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & \\ & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & \\ & & h_{n-2} & 2(h_{n-2}+h_{n-1}) & h_{n-1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \\ c_{n-1} \\ c_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 3(f[x_3,x_2] - f[x_2,x_1]) \\ 3(f[x_4,x_3] - f[x_3,x_2]) \\ 3(f[x_n,x_{n-1}] - f[x_{n-1},x_{n-2}]) \\ 0 \end{Bmatrix}$$

ตัวอย่าง 6.8 เมื่อทำการทดลองหาค่า v_z กับระยะทาง x ให้ข้อมูลดังตารางที่ E6.8-1 จงประมาณความเร็ว v_z ที่ x เท่ากับ 1.0 mm ด้วยวิธีการประมาณค่าในช่วงด้วย Spline ด้วยสมการพหุนามกำลังสาม

ตารางที่ E6.8-1 การทดลองหาค่า v_z กับระยะทาง x

x (m)	0.00	4x10^{-4}	8x10^{-4}	12x10^{-4}	16x10^{-4}
v_z (m/s)	8.04x10^{-2}	5.14x10^{-2}	2.89x10^{-2}	1.29x10^{-2}	3.21x10^{-3}

วิธีทำ

เนื่องจากมีชุดข้อมูลจำนวน 5 ข้อมูล ดังนั้นจากสมการพหุนามกำลังสามต้องมีจำนวน 4 สมการ ดังนี้

$$v_{z1}(x) = a_1 + b_1(x - x_1) + c_1(x - x_1)^2 + d_1(x - x_1)^2 = a_1 + b_1(x-0) + c_1(x-0)^2 + d_1(x-0)^3$$

$$v_{z2}(x) = a_2 + b_2(x - 4\times10^{-4}) + c_2(x - 4\times10^{-4})^2 + d_2(x - 4\times10^{-4})^3$$

$$v_{z3}(x) = a_3 + b_3(x - 8\times10^{-4}) + c_3(x - 8\times10^{-4})^2 + d_3(x - 8\times10^{-4})^3$$

$$v_{z4}(x) = a_4 + b_4(x - 12\times10^{-4}) + c_4(x - 12\times10^{-4})^2 + d_4(x - 12\times10^{-4})^3$$

ขั้นที่ 1

ดังนั้นสามารถหาค่าของ c_i โดยใช้เมทริกซ์ดังต่อไปนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & 0 & 0 \\ 0 & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & 0 \\ 0 & 0 & h_3 & 2(h_3+h_4) & h_4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 3(f[x_3,x_2]-f[x_2,x_1]) \\ 3(f[x_4,x_3]-f[x_3,x_2]) \\ 3(f[x_5,x_4]-f[x_4,x_3]) \\ 0 \end{Bmatrix}$$

$h_i = x_{i+1} - x_i$ และ $f\left[x_{i+1}, x_i\right] = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$

ดังนั้น

$h_1 = x_2 - x_1 = 4\times10^{-4} - 0 = 4\times10^{-4}$

$h_2 = x_3 - x_2 = 8\times10^{-4} - 4\times10^{-4} = 4\times10^{-4}$

$h_3 = x_4 - x_3 = 12\times10^{-4} - 8\times10^{-4} = 4\times10^{-4}$

$h_4 = x_5 - x_4 = 16\times10^{-4} - 12\times10^{-4} = 4\times10^{-4}$

$$f\left[x_2, x_1\right] = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{5.14\times10^{-2} - 8.04\times10^{-2}}{4\times10^{-4} - 0} = -72.5$$

$$f\left[x_3, x_2\right] = \frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2} = \frac{2.89\times10^{-2} - 5.14\times10^{-2}}{8\times10^{-4} - 4\times10^{-4}} = -56.25$$

$$f\left[x_4, x_3\right] = \frac{f(x_4) - f(x_3)}{x_4 - x_3} = \frac{1.29\times10^{-2} - 2.89\times10^{-2}}{12\times10^{-4} - 8\times10^{-4}} = -40$$

$$f\left[x_5, x_4\right] = \frac{f(x_5) - f(x_4)}{x_5 - x_4} = \frac{3.21x10^{-3} - 1.29x10^{-2}}{16\times10^{-4} - 12\times10^{-4}} = -24.225$$

และ

$3\left(f[x_3,x_2] - f[x_2,x_1]\right) = 3\left(-56.25 - (-72.50)\right) = 48.750$

$3\left(f[x_4,x_3] - f[x_3,x_2]\right) = 3\left(-40.00 - (-56.25)\right) = 48.750$

$3\left(f[x_5,x_4] - f[x_4,x_3]\right) = 3\left(-24.225 - (-40.0)\right) = 47.325$

แทนค่าต่างๆ ลงในเมทริกต์ ได้เมทริกต์ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.0004 & 0.0016 & 0.0004 & 0 & 0 \\ 0 & 0.0004 & 0.0016 & 0.0004 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0004 & 0.0016 & 0.0004 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 48.750 \\ 48.750 \\ 47.325 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

เมื่อแก้เมทริกต์จะได้ค่าของ c ดังนี้

$c_1 = 0$

$c_2 = 26052.4554$

$c_3 = 17665.1786$

$c_4 = 25161.8304$

$c_5 = 0$

ขั้นที่ 2 หาค่าของ d จาก $d_i = \dfrac{(c_{i+1} - c_i)}{3h_i}$

ดังนั้น

$$d_1 = \frac{(c_2 - c_1)}{3h_1} = \frac{(26052.4554 - 0)}{3(4\times10^{-4})} = 21,710,379.4643$$

$$d_2 = \frac{(c_3 - c_2)}{3h_2} = \frac{(17665.1786 - 26161.8304)}{3(4\times10^{-4})} = -6,989,397.3214$$

$$d_3 = \frac{(c_4 - c_3)}{3h_3} = \frac{(25161.8304 - 17665.1786)}{3(4\times10^{-4})} = 6,247,209.8214$$

$$d_4 = \frac{(c_5 - c_4)}{3h_4} = \frac{(0 - 25161.8304)}{3(4\times10^{-4})} = -20,968,191.9643$$

ขั้นที่ 3 หาค่าของ b จาก $b_i = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h_i} - \dfrac{h_i}{3}(2c_i + c_{i+1})$

ดังนั้น

$$b_1 = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h_1} - \frac{h_1}{3}(2c_1 + c_2) = \frac{5.14\times10^{-2} - 8.04\times10^{-2}}{4\times10^{-4}} - \frac{4\times10^{-4}}{3}((2\times0) + 26052.4554)$$

$b_1 = -75.9737$

$$b_2 = \frac{f(x_3) - f(x_2)}{h_2} - \frac{h_2}{3}(2c_2 + c_3) = \frac{2.89\times10^{-2} - 5.14\times10^{-2}}{4\times10^{-4}} - \frac{4\times10^{-4}}{3}((2\times26052.4554) + 17665.1786)$$

$b_2 = 65.5527$

$$b_3 = \frac{f(x_4) - f(x_3)}{h_3} - \frac{h_3}{3}(2c_3 + c_4) = \frac{1.29\times10^{-2} - 2.89\times10^{-2}}{4\times10^{-4}} - \frac{4\times10^{-4}}{3}((2\times17665.1786) + 25161.8304)$$

$b_3 = -48.0656$

$$b_4 = \frac{f(x_5) - f(x_4)}{h_4} - \frac{h_4}{3}(2c_4 + c_5) = \frac{3.21\times10^{-3} - 1.29\times10^{-2}}{4\times10^{-4}} - \frac{4\times10^{-4}}{3}((2\times25161.8304) + 0)$$

$b_4 = -30.9348$

ขั้นที่ 4 หาค่าของ a จาก $a_i = f(x_i)$

$a_1 = f(x_1) = 8.04\times10^{-2}$

$a_2 = f(x_2) = 5.14\times10^{-2}$

$a_3 = f(x_3) = 2.89\times10^{-2}$

$a_4 = f(x_4) = 1.29\times10^{-2}$

เมื่อแทนค่าตัวแปรทั้งหมดได้เป็นสมการดังต่อไปนี้

$v_{z1}(x) = 8.04\times10^{-2} - 75.9737x + 21710379.4643x^3$ เมื่อค่า x อยู่ระหว่าง $0 \le x \le 4\times10^{-4}$ m

$v_{z2}(x) = 5.14x10^{-2} - 65.5527(x-4x10^{-4}) + 26052.4554(x-4x10^{-4})^2 - 6989397.3214(x-4x10^{-4})^3$
เมื่อค่า x อยู่ระหว่าง $4x10^{-4} \le x \le 8x10^{-4}$ m

$v_{z3}(x) = 2.89x10^{-2} - 48.0656(x-8x10^{-4}) + 17665.1786(x-8x10^{-4})^2 + 6247209.8214(x-8x10^{-4})^3$
เมื่อค่า x อยู่ระหว่าง $8x10^{-4} \le x \le 12x10^{-4}$ m

$v_{z4}(x) = 1.29x10^{-2} - 30.9348(x-12x10^{-4}) + 25161.8304(x-12x10^{-4})^2 - 20968191.9643(x-12x10^{-4})^3$
เมื่อค่า x อยู่ระหว่าง $12x10^{-4} \le x \le 16x10^{-4}$ m

เนื่องจาก ต้องการหาค่าของความเร็วในแนวแกน x ที่ x เท่ากับ 1.0 mm หรือ $10x10^{-4}$ ดังนั้นใช้สมการของ $v_{z3}(x)$

$$v_{z3}(x) = \left(2.89\times10^{-2}\right) + \left(-48.0656\right)(10^{-3} - 8\times10^{-4}) + \left(17665.1786\right)(10^{-3} - 8\times10^{-4})^2$$
$$+ \left(6247209.8214\right)(10^{-3} - 8\times10^{-4})^3$$

$v_{z3}(x) = 0.02004346 = 2.0043x10^{-2}$ m/s

6.6 การบ้าน

HM6.1 ผลการทดลองเวลาครึ่งชีวิต ($t_{1/2}$) ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของสาร A ต่างๆ ดังตารางที่ HM6.1-1 สำหรับปฏิกิริยา A $\longrightarrow$ B + 2C

ตารางที่ HM6.1-1 ผลการทดลองเวลาครึ่งชีวิต ($t_{1/2}$) ที่ความเข้มข้นเริ่มต้นของสาร A ต่างๆ

$t_{1/2}$ (min)	8.03	8.62	9.26	9.49	8.43
C_{A0} (mol/L)	0.2476	0.1944	0.162	0.1069	0.0745

จงประมาณค่าเวลาครึ่งชีวิตถ้าความเข้มข้นเริ่มต้นของสาร A เท่ากับ 0.185 mol/L

วิธีการ third-order newton’s interpolation

วิธีการ Lagrange interpolating polynomial เมื่อใช้ second-order

วิธีการ Cubic splines

HM6.2 อัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ (Y, mg/L-day) เมื่อทำการปรับความเข้มข้นของสารอาหารต่างๆ (C, mg/L) ให้ผลการทดลองดังตารางที่ HM6.2-1

ตารางที่ HM6.2-1 อัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์ที่ความเข้มข้นของสารอาหารต่างๆ

C, mg/L	0.5	0.8	1.5	2.5	4
Y, mg/L-day	1.1	2.4	5.3	7.6	8.9

จงหาอัตราการเจริญเติบโตของจุลินทรีย์เมื่อความเข้มข้นของสารอาหารเท่ากับ 1.0 mg/L ด้วย

วิธีสมการพหุนาม

วิธีการ forth-order newton’s interpolation

วิธีการ Lagrange interpolating polynomial เมื่อใช้ second-order และ first-order

HM6.3 Xunjun Chen (2015) ได้ศึกษาการดูดซับ phosphate เมื่อใช้ตัวตัวดูดซับ mesoporous MCM-41 ชนิดที่มีกรดอะมิโนจำนวน 10 % ที่จับกับ Fe(III) ให้ผลการทดลองดังตารางที่ HM6.3-1

ตารางที่ HM6.3-1 ความเข้มข้นของ phosphate ที่สมดุลกับปริมาณ phosphate ที่ถูกดูดซับบนตัวดูดซับ

C_e, mg phosphate/L	0.061	0.023	0.35	2.45	16.43	44.40
q_e, mg phosphate/g	0.93	1.91	8.56	17.18	19.74	20.91

จงหาความเข้มข้นของ phosphate ที่สมดุลเมื่อปริมาณ phosphate ที่ถูกดูดซับบนตัวดูดซับเท่ากับ 18 mg phosphate/g ด้วยวิธีการ Cubic splines

6.7 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. สุริยา พันธ์โกศล และ คณิต กฤษณังกูร, การทำนายความหนืดจลน์ของไบโอดีเซลที่อุณหภูมิต่างๆ จากค่าสะปอนนิฟิเคชันและค่าไอโอดีน, วารสารวิจัยและพัฒนา มจธ. ปีที่ 39 ฉบับที่ 2 เมษายน - มิถุนายน 2559

http://pioneer.netserv.chula.ac.th/~ltachai/210/lecture_notes/ch08.pdf

https://www.eng.auburn.edu/~clemept/CEANALYSIS_FALL2011/Week1/non_Linearregression_paper.pdf

4. Xunjun Chen, Modeling of Experimental Adsorption Isotherm Data, Information 2015, 6, 14-22; doi:10.3390/info6010014

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 10

หัวข้อการสอน

บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่จำเป็นต้องหาค่าอินทิกรัล
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู
3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สัน
4. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาพื้นที่ด้วยวิธีริชาร์ดสัน
5. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาค่าอินทิกรัลสองชั้น

เนื้อหา

1. บทนำ
2. การหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู
3. การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สัน
4. การหาพื้นที่ด้วยวิธีริชาร์ดสัน
5. การหาค่าอินทิกรัลสองชั้น

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 7 การประมาณค่าอินทิกรัล

7.1 บทนำ

การคำนวณทางวิศวกรรมเคมีหรือทางวิศวกรรมมักจะอธิบายอยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์ เช่น แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของการฟื้นฟูตัวเร่งปฏิกิริยา Cr-Mg ในเครื่องปฏิกรณ์แบบเบดคงที่ โดยแสดงดังสมการที่ (1.1) แบบจำลองของกระบวนการเกิดปฏิกิริยาและการแพร่ในเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยาทรงกลมสำหรับออกซิเจน ดังสมการ (1.1)

$$\varepsilon_p \frac{\partial C_{O2}^p}{\partial t} = D_{eff}\left(\frac{\partial^2 C_{O2}^p}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_{O2}^p}{\partial r}\right) - W \tag{1.1}$$

ดังนั้นในการหาความเข้มข้นของก๊าซออกซิเจนอยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย เพื่อแก้สมการ (1.1) จำเป็นต้องอินทิเกรตสมการดังกล่าว แต่บางครั้งการอินทิเกรตสมการเชิงอนุพันธ์โดยตรงไม่สามารถทำได้หรือทำได้ยาก ดังนั้นจึงได้มีการพัฒนาวิธีการการประมาณค่าการอินทิเกรตโดยอาศัยสูตรของนิวตัน-โคตส์ (Newton-Cotes formulas) ดังสมการ (7.1)

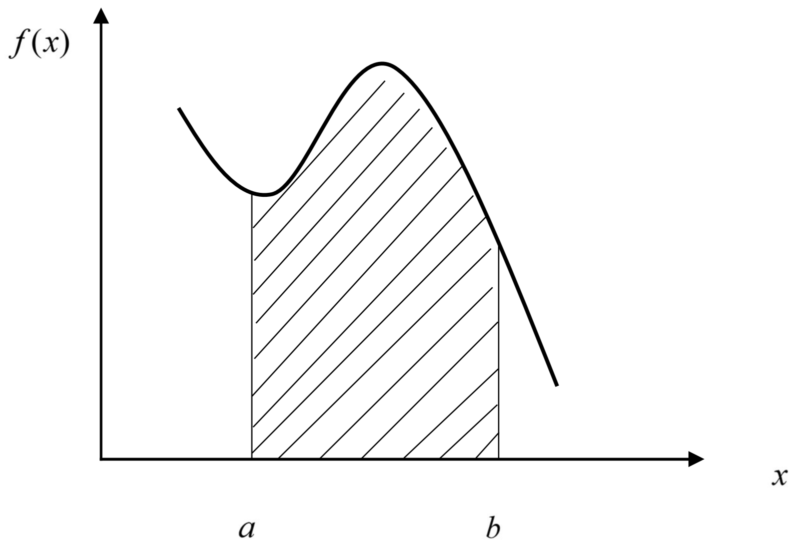
$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{7.1}$$

เมื่อ I คือค่าอินทิกรัลตั้งแต่ขอบเขต a ถึงขอบเขต b $f(x)$ คือฟังก์ชันเชิงอนุพันธ์ที่ต้องการอินทิเกรตเมื่อเทียบกับการเปลี่ยนแปลงของตัวแปร x a คือค่าของขอบเขตล่างที่ต้องการอินทิเกรต และ b คือค่าของขอบเขตบนที่ต้องการอินทิเกรต ดังนั้นเพื่อให้ง่านต่อการหาค่าอินทิกรัลของฟังก์ชันเชิงอนุพันธ์ จึงได้แปลงฟังก์ชันเชิงอนุพันธ์ให้อยู่ในรูปสมการพหุนามดังสมการ (7.2)

$$f_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n \tag{7.2}$$

เมื่อแทนสมการ (7.2) ลงในสมการ (7.1) จะได้สมการ (7.3)

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \left(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_n x^n\right)dx \tag{7.3}$$

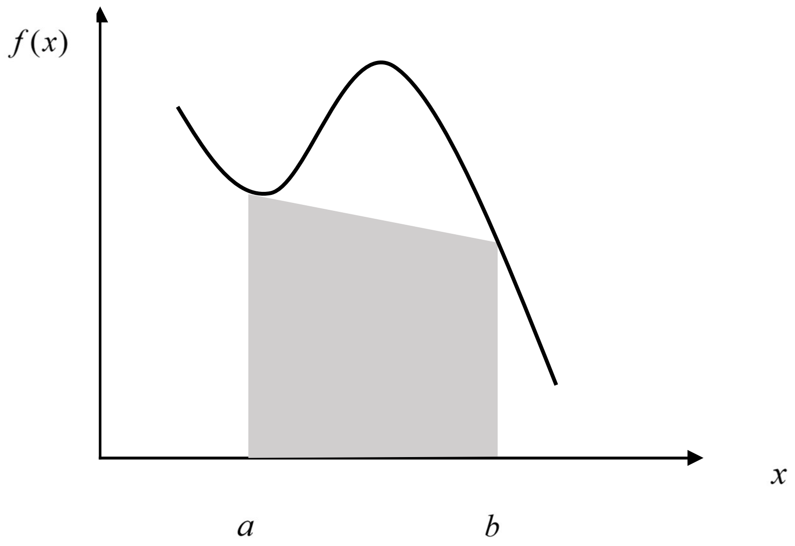


รูปที่ 7.1 แผนภาพแสดงพื้นที่ใต้กราฟระหว่างฟังก์ชัน $f(x)$ เมื่อเทียบกับการเปลี่ยนแปลงของ x

ที่มา: Chapra (2010)

7.2 การหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู

ถ้าแทนสมการเชิงอนุพันธีด้วยสมการพหุนามที่ n เท่ากับ 1 ซึ่งจะได้เป็นสมการเส้นตรง ดังรูปที่ 7.2 จากรูป 7.2 พบว่าการหาพื้นที่ใต้กราฟสามารถหาได้โดยการใช้กฎสี่เหลี่ยมคางหมู (The trapezoidal rule) ซึ่งจะพบว่า การหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูจะมีความคลาดเคลื่อนเกิดขึ้น



รูปที่ 7.2 แผนภาพแสดงพื้นที่ใต้กราฟเมื่อใช้สมการเส้นตรง

ที่มา: Chapra (2010)

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

$$I=\int_a^b\left[f(a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)\right]dx$$

ซึ่งอินทิเกรตจะได้เป็น

$$I=\left(f(a)x\right)\Big|_a^b+\left(\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{1}{2}x^2\right)\Big|_a^b-\left(\frac{f(b)-f(a)}{b-a}ax\right)\Big|_a^b$$

$$I=f(a)(b-a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{1}{2}(b^2-a^2)-\frac{f(b)-f(a)}{b-a}a(b-a)$$

$$I=f(a)(b-a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}\frac{1}{2}(b+a)(b-a)-a\left(f(b)-f(a)\right)$$

$$I=f(a)(b-a)+\frac{1}{2}\left(f(b)-f(a)\right)(b+a)-a\left(f(b)-f(a)\right)$$

$$I=bf(a)-af(a)+\frac{1}{2}\left(f(b)-f(a)\right)(b+a)-af(b)+af(a)$$

$$I=bf(a)-af(b)+\frac{1}{2}\left(f(b)-f(a)\right)(b+a)$$

$$I=\left(f(b)-f(a)\right)\frac{b+a}{2}+bf(a)-af(b)$$

$$I=(b-a)\frac{\left(f(b)-f(a)\right)}{2}$$

การหาค่าความผิดพลาดจากการหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูสามารถสามารถหาได้ดังนี้ เนื่องจากถ้ากระจายฟังก์ชันเชิงอนุพันธ์เพื่อหาค่าของฟังก์ชันที่จุด $x=x_{i+1}$ จากจุด $x=x_i$ ด้วยอนุกรมเทย์เลอร์ดังสมการ (7.3) แล้วแทนลงในสมการ (7.1) ได้เป็นสมการ (7.4) ซึ่งเป็นพื้นที่ใต้กราฟที่แท้จริง (I_E)

$$f(x_{i+1})=f(x_i)+f'(x_i)(x-x_i)+\frac{1}{2!}f''(x_i)(x-x_i)^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_i)(x-x_i)^n+\ldots \tag{7.3}$$

$$I_E=\int_{x_i}^{x_{i+1}}f(\text{x})dx=\int_{x_i}^{x_{i+1}}\left(f(x_i)+f'(x_i)(x-x_i)+\frac{1}{2!}f''(x_i)(x-x_i)^2+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_i)(x-x_i)^n+\ldots\right)dx$$

$$I_E=\left[f(x_i)(x-x_i)+f'(x_i)\frac{(x-x_i)^2}{2}+\frac{1}{2!}f''(x_i)\frac{(x-x_i)^3}{3}+\ldots+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_i)\frac{(x-x_i)^{n+1}}{n}+\ldots\right]_{x_i}^{x_{i+1}}$$

(7.4)

เมื่อแทนค่า $x_{i+1}=x_i+h$ ดังสมการ (7.5)

$$I_E=hf(x_i)+\frac{h^2}{2!}f'(x_i)+\frac{h^3}{3!}f''(x_i)+\ldots+\frac{h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n)}(x_i)+\ldots \tag{7.5}$$

สำหรับพื้นที่ใต้กราฟที่หาด้วยสี่เหลี่ยมคางหมูสามารถแท้ด้วย (I_A) ดังสมการ (7.6)

$$I_A=\frac{h}{2}\left(f(x_i)+f(x_{i+1})\right) \tag{7.6}$$

ดังนั้นความคลาดเคลื่อนสามารถหาได้จากสมการ (7.7)

$$E_a = I_E - I_A$$

$$E_a = I_E - I_A = hf(x_i) + \frac{h^2}{2!} f'(x_i) + \frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(x_i) + \ldots - \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1}) \right)$$

$$E_a = I_E - I_A = hf(x_i) + \frac{h^2}{2!} f'(x_i) + \frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(x_i) + \ldots - \frac{h}{2} f(x_i)$$
$$- \frac{h}{2}\left(f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x_i) + \ldots \right)$$

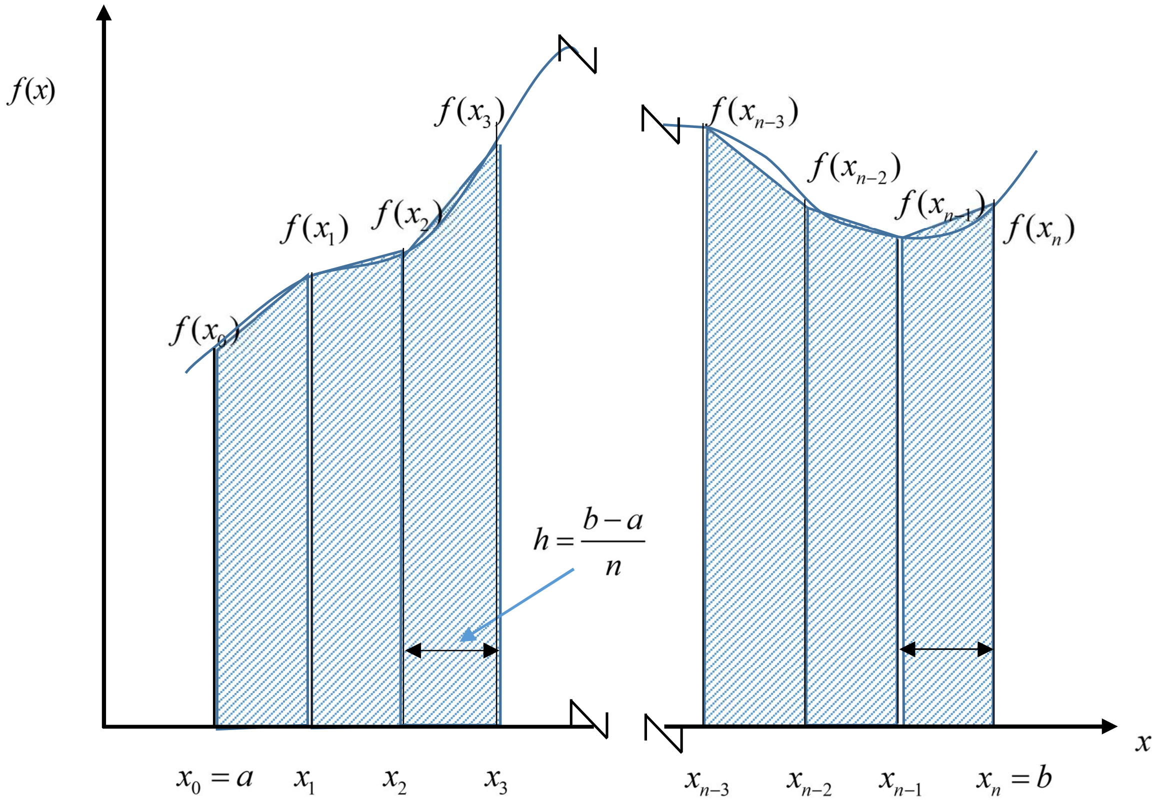
$$E_a = hf(x_i) + \frac{h^2}{2!} f'(x_i) + \frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(x_i) + \ldots - \frac{h}{2} f(x_i)$$
$$- \frac{h}{2} f(x_i) - \frac{h}{2}\left(hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x_i) + \ldots \right)$$

$$E_a = \frac{1}{2}\left(\frac{h^3}{3!} f''(x_i) + \ldots + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n)}(x_i) + \ldots \right)$$

ถ้าคิดค่าความคลาดเคลื่อนเฉพาะพจน์แรกดังเป็นสมการ (7.7)

$$E_a = \frac{1}{2}\frac{h^3}{3!} f''(x_i) = \frac{h^3}{12} f''(x_i) \qquad (7.7)$$

จากสมการ (7.7) จะเห็นได้ว่าเมื่อค่า h มีค่าลดลงจะทำให้ค่าความคลาดเคลื่อนมีค่าลดลงด้วยเช่นกัน ดังนั้นถ้าแบ่งพื้นที่ออกเป็นจำนวน n ช่วง ดังรูปที่ 7.3 ดังนั้นแต่ละช่วงจะห่างกันดังนี้ $h = \frac{b-a}{n}$



รูปที่ 7.3 การหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู n ช่วง

ที่มา: Chapra (2010)

ถ้ากำหนดให้ $a = x_0$ และ $b = x_n$ ดังนั้น $x_1 = h + x_0$, $x_2 = h + x_1$ จนถึง $x_n = h + x_{n-1}$ ดังนั้นพื้นที่ใต้กราฟทั้งหมดด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูดังสมการ (7.8)

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx$$

แทนค่า

$$I = h\frac{f(x_1) + f(x_0)}{2} + h\frac{f(x_2) + f(x_1)}{2} + \ldots + h\frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

$$I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right] \tag{7.8}$$

ค่าความคลาดเคลื่อนจากการหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูทั้งหมดสามารถหาได้เกิดจากผลรวมของการค่าความคลาดเคลื่อนในแต่ละช่วง ดังสมการที่ (7.9)

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) \tag{7.9}$$

เมื่อ $f''(\xi_i)$ เป็นค่าอนุพันธ์อันดับสองที่จุด ξ_i ที่ช่วง i ดังนั้นถ้าให้ $\overline{f(x)}''$ เป็นค่าเฉลี่ยของค่าอนุพันธ์อันดับสองแล้ว จะได้

$$\overline{f(x)}'' \simeq \frac{\sum_{i=1}^{n} f''(x)}{n}$$ หรือ $\sum_{i=1}^{n} f''(x) = n\overline{f(x)}''$ ดังนั้นสมการ (7.9) จะได้เป็นสมการ (7.10)

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i) = -\frac{(b-a)^3}{12n^3} n\overline{f(\xi)}'' = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\overline{f(\xi)}'' \tag{7.10}$$

เมื่อ $\overline{f(x)}'' = \dfrac{\int_a^b f(x)''dx}{b-a}$

ตัวอย่าง 7.1 ท่อระบายน้ำมันรูปทรงสี่เหลี่ยมต่อกับถังผสมน้ำมันในแนวตั้ง โดยน้ำมันไหลล้นจากถังผสมมายังท่อระบายน้ำมัน พบว่า ความเร็วในการไหลของน้ำมัน (v_z) มีค่าเท่ากับ $v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu}\left[1 - \left(\frac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อความหนาของชั้นน้ำมัน (δ) มีค่าเท่ากับ 2.0 mm ความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm ความหนาแน่นของน้ำมัน (ρ) มีค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 ความหนืดของน้ำมัน (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s และความเร่งจากแรงโน้มถ่วงของโลก (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2 เมื่อ x คือระยะทางในชั้นน้ำมันในแนวแกน x ถ้าความเร็วเฉลี่ยมีค่าเท่ากับ $v_{z,avg} = \frac{\int_0^W \int_0^\delta v_z dxdy}{\delta W} = \frac{W\int_0^\delta v_z dx}{\delta W} = \frac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta}$ จงหาความเร็วเฉลี่ยของน้ำมันด้วยวิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูเมื่อแบ่งช่วงการคำนวณออกเป็น 2 ส่วน 4 ส่วน และ 8 ส่วน พร้อมหาค่าความคลาดเคลื่อน

วิธีทำ

จาก $v_z = \dfrac{\rho g\delta^2}{2\mu}\left[1-\left(\dfrac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อแทนค่าความหนาของชั้นน้ำมัน (δ) มีค่าเท่ากับ 2.0 mm ความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm ความหนาแน่นของน้ำมัน (ρ) มีค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 ความหนืดของน้ำมัน (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s และความเร่งจากแรงโน้มถ่วง (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2

$$v_z = \left[\frac{820\times 9.8\times(0.002)^2}{2(0.2)}\right]\left[1-\left(\frac{x}{0.002}\right)^2\right] = 0.08036\left[1-2.5x10^5x^2\right]$$

ค่าความคลาดเคลื่อนจากสมการ (7.9)

$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi)$$

เมื่อ $v_z = 0.08036\left[1-2.5x10^5x^2\right]$

ดังนั้น $\dfrac{d^2v_z}{dx^2} = \dfrac{d^2}{dx^2}\left(0.08036\left[1-2.5\times 10^5x^2\right]\right) = (0.08036)\left(2.5\times 10^5(-2x)\right)$

$$E_t = -\frac{h^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n}\left(f''(v_z)\right)$$

$$E_t = -\frac{(2\times 10^{-3}-0)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n}\left(-(0.08036)\left(5.0\times 10^5x\right)\right) = -\frac{6.6667\times 10^{-10}}{n^3}\sum_{i=1}^{n}\left(-4.0180\times 10^5x\right)$$

$$E_t = \frac{2.6787\times 10^{-4}}{n^3}\sum_{i=1}^{n}x$$

กรณีที่ 1 เมื่อแบ่งพื้นที่ออกเป็น 2 ส่วน (n=2)

ดังนั้นจะมีจุดที่ใช้ในการคำนวณ 3 จุด ซึ่งแต่ละจุดห่างกันดังนี้ $h = \dfrac{2x10^{-3}}{2} = 1x10^{-3}$ จะได้ $x_0 = 0$ m, $x_1 = 1x10^{-3}$ m และ $x_2 = 2x10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1 = 1x10^{-3}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(1x10^{-3})^2\right] = 0.06027$ m/s

จุดที่ $x_2 = 2x10^{-3}$ m ได้ $v_{z2} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(2x10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

เมื่อแทนลงในสมการ (7.8) ได้เป็น

$$I_2 = \frac{h}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(x_n)\right] = \frac{h}{2}\left[f(x_0)+2f(x_1)+f(x_2)\right]$$

$$I_2 = \frac{1x10^{-3}}{2}\left[f(x_0)+2f(x_1)+f(x_2)\right] = \frac{1x10^{-3}}{2}\left[0.08036+2(0.06027)+0\right] = 1.0045x10^{-4}\ \text{m}^2\text{/s}$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \dfrac{\int_0^{\delta} v_z dx}{\delta} = \dfrac{1.0045x10^{-4}}{2x10^{-3}} = 0.05022$ m/s

ค่าความคลาดเคลื่อน เมื่อ n เท่ากับ 2

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{n^3}\sum_{i=1}^{n} x$$

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{n^3}\sum_{i=1}^{n} x = \frac{2.6787\times10^{-4}}{2^3}\left(0+1\times10^{-3}+2\times10^{-3}\right) = \frac{2.6787\times10^{-4}}{2^3}\left(3\times10^{-3}\right) = 1.0045\times10^{-7}$$

กรณีที่ 2 เมื่อแบ่งพื้นที่ออกเป็น 4 ส่วน

ดังนั้นจะมีจุดที่ใช้ในการคำนวณ 5 จุด ซึ่งแต่ละจุดห่างกันดังนี้ $h = \frac{2\times10^{-3}}{4} = 5\times10^{-4}$ จะได้ $x_0 = 0$ m, $x_1 = 5\times10^{-4}$ m $x_2 = 1\times10^{-3}$ m $x_3 = 1.5\times10^{-3}$ m และ $x_4 = 2\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1 = 5\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(5\times10^{-4})^2\right] = 0.07533$ m/s

จุดที่ $x_2 = 1\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z2} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1\times10^{-3})^2\right] = 0.06027$ m/s

จุดที่ $x_3 = 1.5\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z3} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.5\times10^{-3})^2\right] = 0.03515$ m/s

จุดที่ $x_4 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z4} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(2\times10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

เมื่อแทนลงในสมการ (7.8) ได้เป็น

$$I_4 = \frac{h}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)+f(x_n)\right] = \frac{h}{2}\left[f(x_0)+2f(x_1)+2f(x_2)+2f(x_3)+f(x_4)\right]$$

$$I_4 = \left(2.5\times10^{-4}\right)\left[0.08036+2(0.07533)+2(0.06027)+2(0.03515)+0\right]$$

$$I_4 = 1.05465\times10^{-4}\ m^2/s$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \frac{\int_0^{\delta} v_z dx}{\delta} = \frac{1.05465\times10^{-4}}{2\times10^{-3}} = 0.05273$ m/s

ค่าความคลาดเคลื่อน เมื่อ n เท่ากับ 4

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{n^3}\sum_{i=1}^{n} x = \frac{2.6787\times10^{-4}}{4^3}\left(0+0.5\times10^{-3}+1\times10^{-3}+1.5\times10^{-3}+2\times10^{-3}\right)$$

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{4^3}\left(5\times10^{-3}\right) = 2.0927\times10^{-8}$$

กรณีที่ 3 เมื่อแบ่งพื้นที่ออกเป็น 8 ส่วน

ดังนั้นจะมีจุดที่ใช้ในการคำนวณ 9 จุด ซึ่งแต่ละจุดห่างกันดังนี้ $h = \frac{2\times10^{-3}}{8} = 2.5\times10^{-4}$ จะได้ $x_0 = 0$ m, $x_1 = 2.5\times10^{-4}$ m $x_2 = 5\times10^{-4}$ m $x_3 = 7.5\times10^{-4}$ m $x_4 = 1\times10^{-3}$ m $x_5 = 1.25\times10^{-3}$ m $x_6 = 1.5\times10^{-3}$ m $x_7 = 1.75\times10^{-3}$ m และ $x_8 = 2\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s
จุดที่ $x_1 = 2.5\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(2.5\times10^{-4})^2\right] = 0.07910$ m/s
จุดที่ $x_2 = 5\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z2} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(5\times10^{-4})^2\right] = 0.07533$ m/s
จุดที่ $x_3 = 7.5\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z3} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(7.5\times10^{-4})^2\right] = 0.06905$ m/s
จุดที่ $x_4 = 1\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z4} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1\times10^{-3})^2\right] = 0.06027$ m/s
จุดที่ $x_5 = 1.25\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z5} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.25\times10^{-3})^2\right] = 0.04896$ m/s
จุดที่ $x_6 = 1.5\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z6} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.5\times10^{-3})^2\right] = 0.03515$ m/s
จุดที่ $x_7 = 1.75\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z7} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.75\times10^{-3})^2\right] = 0.01883$ m/s
จุดที่ $x_8 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z8} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(2\times10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

เมื่อแทนลงในสมการ (7.8) ได้เป็น

$$I_8 = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right]$$

$$= \frac{h}{2}[f(x_0)+2f(x_1)+2f(x_2)+2f(x_3)+2f(x_4)+2f(x_5)+2f(x_6)+2f(x_7)+f(x_8)]$$

$$I_8 = \frac{2.5\times10^{-4}}{2}\begin{bmatrix}0.08036+2(0.07910)+2(0.07533)+2(0.06905)+2(0.06027)\\ +2(0.04896)+2(0.03515)+2(0.01883)+0\end{bmatrix} = 1.06717\times10^{-4}$$

$$I_8 = 1.06717\times10^{-4}\ \text{m}^2/\text{s}$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \dfrac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta} = \dfrac{1.06717\times10^{-4}}{2\times10^{-3}} = 0.05335$ m/s

ค่าความคลาดเคลื่อน เมื่อ n เท่ากับ 8

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{n^3}\sum_{i=1}^{n} x = \frac{2.6787\times10^{-4}}{8^3}(0+0.25+0.50+0.75+1.00+1.25+1.50+1.75+2.00)10^{-3}$$

$$E_t = \frac{2.6787\times10^{-4}}{8^3}9\times10^{-3} = 4.7086\times10^{-9}$$

7.3 การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สัน

การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สัน (Simpson's rule) เป็นการใช้สมการพหุนามกำลังสองในการหาค่าพื้นที่ใต้กราฟ ซึ่งสามารถแบ่งการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันออกเป็น 2 วิธี คือ 1. การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสามและ 2 การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด

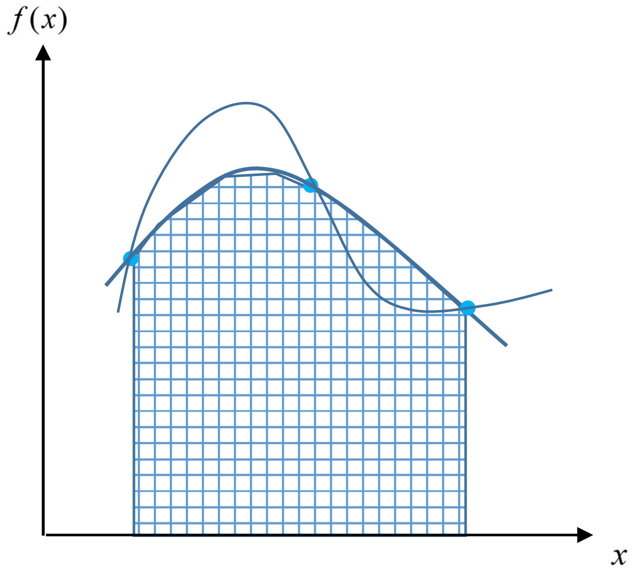
7.3.1. การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม

การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม (Simpson's 1/3 rule) เป็นการประยุกต์สมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์ดังสมการ (7.11) ดังรูปที่ 7.4

$$f_2(x) = L_1 f(x_0) + L_2 f(x_1) + L_3 f(x_2) \tag{7.11}$$

เมื่อ L_1 L_2 และ L_3 เป็นค่าสัมประสิทธิ์การถ่วงน้ำหนักเชิงเส้นตรงของลากรองจ์ ดังนี้

$$L_1 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$
$$L_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$
$$L_3 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$



รูปที่ 7.4 แผนภาพแสดงพื้นที่ใต้กราฟเมื่อใช้สมการพหุนามกำลังสองของลากรองจ์
ที่มา: Chapra (2010)

ดังนั้นการหาพื้นที่ใต้กราฟตั้งแต่จุด $x = x_0$ ถึง $x = x_2$ และ $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$ ดังสมการ (7.12)

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} \left[L_1 f(x_0) + L_2 f(x_1) + L_3 f(x_2)\right] dx$$

เมื่อ

$$L_1 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(-h)(-2h)} = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}$$
$$L_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(h)(-h)} = -\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{h^2}$$
$$L_3 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(2h)(h)} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2}$$

ดังนั้นเมื่อแทนค่า L_1 L_2 และ L_3 ลงในสมการ (7.12) ได้เป็นสมการ (7.13)

$$I=\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)-\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{h^2}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2h^2}f(x_2)\right]dx \quad (7.13)$$

ปรับสมการโดยแทนค่า

$$(x-x_1)(x-x_2)=(x-x_1)(x-x_1-h)=(x-x_1)^2-h(x-x_1)$$

$$(x-x_0)(x-x_2)=(x-x_1+h)(x-x_1-h)=(x-x_1)^2-h^2$$

$$(x-x_0)(x-x_1)=(x-x_1+h)(x-x_1)=(x-x_1)^2+h(x-x_1)$$

หาค่าอินทิกรัลแต่ละพจน์แรกในสมการ (7.13)

$$\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)^2-h(x-x_1)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left[\frac{(x-x_1)^3}{3}-\frac{h(x-x_1)^2}{2}\right]_{x_0}^{x_2}$$

$$\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left(\left[\frac{(x_2-x_1)^3}{3}-\frac{h(x_2-x_1)^2}{2}\right]-\left[\frac{(x_0-x_1)^3}{3}-\frac{h(x_0-x_1)^2}{2}\right]\right)$$

$$\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left(\left[\frac{h^3}{3}-\frac{hh^2}{2}\right]-\left[\frac{(-h)^3}{3}-\frac{h(-h)^2}{2}\right]\right)$$

$$\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left(\left[\frac{h^3}{3}-\frac{hh^2}{2}\right]-\left[\frac{-h^3}{3}-\frac{hh^2}{2}\right]\right)$$

$$\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{2h^2}f(x_0)\right]dx=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left(\frac{h^3}{3}-\frac{h^3}{2}+\frac{h^3}{3}+\frac{h^3}{2}\right)=\frac{f(x_0)}{2h^2}\left(\frac{2h^3}{3}\right)=\frac{f(x_0)h}{3}$$

พจน์ที่สองและพจน์ที่สามทำในทำนองเดียวกันกับพจน์แรกจะดังนั้นสมการ (7.13) ได้เป็นสมการ (7.14)

$$I=\frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)] \quad (7.14)$$

เมื่อแทนค่า $h=\dfrac{b-a}{2}$ ดังนั้นสมการ (7.14) ได้เป็นสมการ (7.15)

$$I=\frac{b-a}{6}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)] \quad (7.15)$$

การหาค่าความผิดพลาดจากการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสามสามารถหาได้ดังนี้ ถ้ากระจายฟังก์ชันเชิงอนุพันธ์เพื่อหาค่าของฟังก์ชันที่จุด $x=x_{i+1}$ จากจุด $x=x_i$ ด้วยอนุกรมเทย์เลอร์ดังสมการ (7.3) แล้วแทนลงในสมการ (7.1) ได้เป็นสมการ (7.15) ซึ่งเป็นพื้นที่ใต้กราฟที่แท้จริง (I_E) จาก $x=x_i$ ถึง $x=x_{i+2}$

$$f(x_{i+1})=f(x_i)+f'(x_i)(x-x_i)+\frac{1}{2!}f''(x_i)(x-x_i)^2+...+\frac{1}{n!}f^{(n)}(x_i)(x-x_i)^n+... \quad (7.3)$$

$$I_E = \int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x)dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left(f(x_i) + f'(x_i)(x-x_i) + \frac{1}{2!} f''(x_i)(x-x_i)^2 + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_i)(x-x_i)^n + \ldots \right) dx$$

$$I_E = \left[f(x_i)(x-x_i) + f'(x_i)\frac{(x-x_i)^2}{2} + \frac{1}{2!} f''(x_i)\frac{(x-x_i)^3}{3} + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_i)\frac{(x-x_i)^{n+1}}{n} + \ldots \right]_{x_i}^{x_{i+2}}$$

เนื่องจาก $x_{i+2} = x_i + 2h$

$$I_E = \left[f(x_i)(2h) + f'(x_i)\frac{(2h)^2}{2} + \frac{1}{2!} f''(x_i)\frac{(2h)^3}{3} + \frac{1}{3!} f^{(3)}(x_i)\frac{(2h)^4}{4} + \frac{1}{4!} f^{(4)}(x_i)\frac{(2h)^5}{5} + \ldots \right]$$

$$I_E = 2hf(x_i) + 2h^2 f'(x_i) + \frac{4h^3}{3} f''(x_i) + \frac{2h^4}{3} f^{(3)}(x_i) + \frac{4h^5}{15} f^{(4)}(x_i) + \ldots \qquad (7.15)$$

สำหรับพื้นที่ใต้กราฟที่หาด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม (I_A) ดังสมการ (7.16)

$$I = \frac{h}{3}\left[f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}) \right] \qquad (7.16)$$

ดังนั้นความคลาดเคลื่อนสามารถหาได้จากสมการ (7.17)

$$E_a = I_E - I_A$$

$$E_a = I_E - I_A = 2hf(x_i) + 2h^2 f'(x_i) + \frac{4h^3}{3} f''(x_i) + \frac{2h^4}{3} f^{(3)}(x_i) + \frac{4h^5}{15} f^{(4)}(x_i) + \ldots$$
$$- \frac{h}{3}\left(f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2} \right)$$

$$E_a = I_E - I_A = 2hf(x_i) + 2h^2 f'(x_i) + \frac{4h^3}{3} f''(x_i) + \frac{2h^4}{3} f^{(3)}(x_i) + \frac{4h^5}{15} f^{(4)}(x_i) + \ldots$$
$$- \frac{4h}{3}\left(f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(x_i) \ldots \right)$$
$$- \frac{h}{3}\left(f(x_i) + 2hf'(x_i) + \frac{(2h)^2}{2!} f''(x_i) + \frac{(2h)^3}{3!} f^{(3)}(x_i) + \frac{(2h)^4}{4!} f^{(4)}(x_i) + \ldots \right)$$

$$E_a = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(x_i) + \ldots..$$

ถ้าคิดค่าความคลาดเคลื่อนเฉพาะพจน์แรกดังเป็นสมการ (7.17)

$$E_a = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

หรือ

$$E_a = -\frac{1}{90} h^5 f^4(\xi) = -\frac{1}{2880}(b-a)^5 f^4(\xi) \qquad (7.17)$$

7.3.2. การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด

การหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งสามส่วนแปด (Simpson's 3/8 rule) เป็นการประยุกต์สมการพหุนามกำลังสามของลากรองจ์ดังสมการ (7.18) ดังรูปที่ 7.5

$$f_3(x) = L_1 f(x_0) + L_2 f(x_1) + L_3 f(x_2) + L_4 f(x_3) \tag{7.18}$$

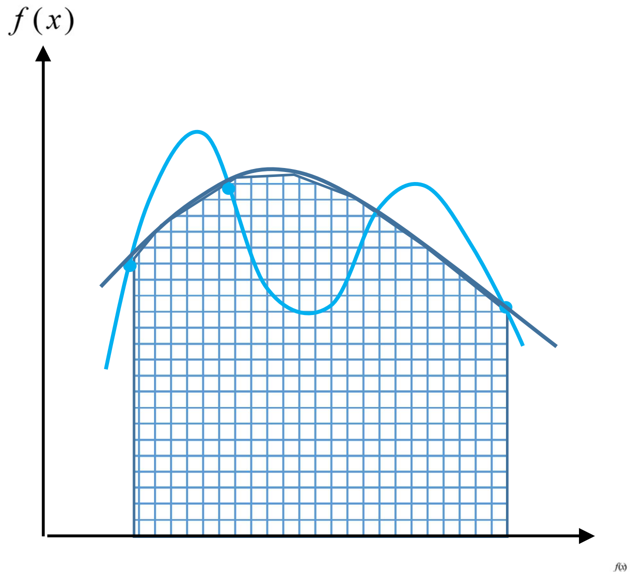
เมื่อ L_1 L_2 L_3 และ L_4 เป็นค่าสัมประสิทธิ์การถ่วงน้ำหนักเชิงเส้นตรงของลากรองจ์ ดังนี้

$$L_1 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}$$

$$L_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x_0-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}$$

$$L_3 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$L_4 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$



รูปที่ 7.5 แผนภาพแสดงพื้นที่ใต้กราฟเมื่อใช้สมการพหุนามกำลังสามของลากรองจ์

ที่มา: Chapra (2010)

ดังนั้นการหาพื้นที่ใต้กราฟตั้งแต่จุด $x = x_0$ ถึง $x = x_3$ และ $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = x_3 - x_2$ ดังสมการ (7.19)

$$I = \int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = \int_{x_0}^{x_3} \left[L_1 f(x_0) + L_2 f(x_1) + L_3 f(x_2) + L_4 f(x_3)\right]dx \tag{7.19}$$

สำหรับการพิสูจน์การหาพื้นที่ใต้กราฟสามารถทำเช่นเดียวกับวิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม สำหรับการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด ดังสมการ (7.20)

$$I = \frac{3h}{8}\left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)\right] \tag{7.20}$$

เมื่อ $h=\dfrac{b-a}{3}$ ดังนั้น

$$I=\frac{b-a}{8}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right]$$

ค่าความผิดพลาดจากการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดได้จากสมการที่ (7.21)

$$E_t=-\frac{3}{80}h^5f^4(\xi)=-\frac{1}{6480}(b-a)^5f^4(\xi) \tag{7.21}$$

ตัวอย่าง 7.2 ท่อระบายน้ำมันรูปทรงสี่เหลี่ยมในแนวดิ่งพบว่า ความเร็วในการไหลของน้ำมันในแนวแกน z (v_z) มีค่าเท่ากับ $v_z=\dfrac{\rho g\delta^2}{2\mu}\left[1-\left(\dfrac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อ x คือระยะทางในชั้นน้ำมันในแนวแกน x ชั้นน้ำมันมีความหนา (δ) ค่าเท่ากับ 2.0 mm มีความหนาแน่น (ρ) ค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 มีความหนืด (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s เมื่อความเร่งจากแรงโน้มถ่วง (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2 จงหาความเร็วเฉลี่ยในการไหลของน้ำมันในแนวแกน z ($v_{z,avg}$) เมื่อ $v_{z,avg}=\dfrac{\int_0^W\int_0^\delta v_z dxdy}{\delta W}=\dfrac{W\int_0^\delta v_z dx}{\delta W}=\dfrac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta}$ ด้วยวิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม 2 ครั้ง และวิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด 1 ครั้ง เมื่อความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm

วิธีทำ

จาก $v_z=\dfrac{\rho g\delta^2}{2\mu}\left[1-\left(\dfrac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อแทนค่าความหนาของชั้นน้ำมัน (δ) มีค่าเท่ากับ 2.0 mm ความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm ความหนาแน่นของน้ำมัน (ρ) มีค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 ความหนืดของน้ำมัน (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s และความเร่งจากแรงโน้มถ่วง (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2

$$v_z=\left[\frac{820\times 9.8\times(0.002)^2}{2(0.2)}\right]\left[1-\left(\frac{x}{0.002}\right)^2\right]=0.08036\left[1-2.5x10^5x^2\right]$$

1. วิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม 2 ครั้ง

ดังนั้นจะมีจุดที่ใช้ในการคำนวณ 3 จุด สำหรับการคำนวณ 1 ครั้ง ดังนั้นการคำนวณ 2 ครั้ง จะใช้จุดทั้งหมด 5 จุด ซึ่งแต่ละจุดห่างกันดังนี้ $h=\dfrac{2\times10^{-3}-0\times10^{-3}}{5}=5\times10^{-4}$ จะได้ $x_0=0$ m, $x_1=0.5\times10^{-3}$ m, $x_2=1.0\times10^{-3}$ m, $x_3=1.5\times10^{-3}$ และ $x_4=2.0\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0=0$ m ได้ $v_{z0}=0.08036\left[1-2.5\times10^5(0)^2\right]=0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1=5\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z1}=0.08036\left[1-2.5\times10^5(5\times10^{-4})^2\right]=0.07533$ m/s

จุดที่ $x_2=1\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z2}=0.08036\left[1-2.5\times10^5(1\times10^{-3})^2\right]=0.06027$ m/s

จุดที่ $x_3 = 1.5\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z3} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.5\times10^{-3})^2\right] = 0.03515$ m/s

จุดที่ $x_4 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z4} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(2\times10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

สูตรซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]$$

เนื่องจากคำนวณ 2 ครั้ง ดังนั้น $I = I_1 + I_2$

$$I_1 = \frac{b-a}{6}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)] = \frac{1\times10^{-3}-0}{6}\left[0.08036+4\times0.07533+0.06027\right] = 7.3658\times10^{-5}$$

$$I_2 = \frac{2\times10^{-3}-1\times10^{-3}}{6}\left[0.06027+4\times0.03515+0\right] = 3.3478\times10^{-5}$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \dfrac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta} = \dfrac{I_1+I_2}{2\times10^{-3}} = \dfrac{7.3658\times10^{-5}+3.3478\times10^{-5}}{2\times10^{-3}} = 5.3568\times10^{-2}$ m/s

2. วิธีการหาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด 1 ครั้ง

ดังนั้นจะมีจุดที่ใช้ในการคำนวณ 4 จุด สำหรับการคำนวณ 1 ครั้ง ซึ่งแต่ละจุดห่างกันดังนี้ $h = \dfrac{2\times10^{-3}-0\times10^{-3}}{3} = 6.67\times10^{-4}$ จะได้ $x_0 = 0$ m, $x_1 = 6.67\times10^{-4}$ m, $x_2 = 1.33\times10^{-3}$ m และ $x_4 = 2.0\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1 = 6.67\times10^{-4}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(6.67\times10^{-4})^2\right] = 0.07144$ m/s

จุดที่ $x_2 = 1.33\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z2} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(1.33\times10^{-3})^2\right] = 0.04471$ m/s

จุดที่ $x_3 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z3} = 0.08036\left[1-2.5\times10^5(2\times10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

สูตรซิมป์สันแบบหนึ่งสามส่วนแปด

$$I = \frac{b-a}{8}[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)]$$

$$I = \frac{2\times10^{-3}-0}{8}\left[0.08036+3\times0.07144+3\times0.04471+0\right] = 1.0720\times10^{-4}$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \dfrac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta} = \dfrac{I}{2\times10^{-3}} = \dfrac{1.0720\times10^{-4}}{2\times10^{-3}} = 5.3601\times10^{-2}$ m/s

7.4 การหาพื้นที่ด้วยวิธีริชาร์ดสัน

การหาพื้นที่ด้วยวิธีริชาร์ดสัน (Richardson extrapolation) ได้อาศัยการหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมู ดังสมการ

$$I = I(h) + E(h)$$

ถ้าทำการแบ่งช่วงการหาพื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูจะพบว่าถ้าใช้ระยะห่างเท่ากับ h_1 และ h_2 จะพบว่าการหาพื้นที่ด้วยสี่เหลี่ยมคางหมูดังสมการ

$$I = I(h_1) + E(h_1)$$

$$I = I(h_2) + E(h_2)$$

ค่าความผิดพลาดจากการหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูที่แบ่งช่วงออกเป็นจำนวน n ช่วงสามารถหาได้จากสมการที่ (7.3)

$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\overline{f}''(\xi)$$

เมื่อ

$$h = \frac{b-a}{n} \text{ หรือ } n = \frac{b-a}{h}$$

ดังนั้น

$$E_t = -\frac{(b-a)}{12}h^2\overline{f}''(\xi)$$

ดังนั้นสามารถประมาณค่า

$$\frac{E(h_1)}{E(h_2)} = \frac{h_1^2}{h_2^2} \text{ หรือ } E(h_1) = \frac{h_1^2}{h_2^2}E(h_2)$$

$$I(h_1) + E(h_1) = I(h_2) + E(h_2)$$

แทนค่า

$$I(h_1) + \frac{h_1^2}{h_2^2}E(h_2) = I(h_2) + E(h_2)$$

$$E(h_2) = \frac{I(h_1) - I(h_2)}{1 - \frac{h_1^2}{h_2^2}}$$

ดังนั้น

$$I = I(h_2) + E(h_2)$$

$$I = I(h_2) + \frac{I(h_1) - I(h_2)}{1 - \frac{h_1^2}{h_2^2}}$$

$$I = I(h_2) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{\frac{h_1^2}{h_2^2} - 1}$$

เนื่องจาก $h_1 = 2h_2$

$$I = I(h_2) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{\frac{4h_2^2}{h_2^2} - 1} = I(h_2) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{3} = \frac{4}{3}I(h_2) - \frac{1}{3}I(h_1)$$

ตัวอย่าง 7.3 ท่อระบายน้ำมันรูปทรงสี่เหลี่ยมในแนวดิ่งพบว่า ความเร็วในการไหลของน้ำมันในแนวแกน z (v_z) มีค่าเท่ากับ $v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu}\left[1 - \left(\frac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อ x คือระยะทางในชั้นน้ำมันในแนวแกน x ชั้นน้ำมันมีความหนา (δ) ค่าเท่ากับ 2.0 mm มีความหนาแน่น (ρ) ค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 มีความหนืด (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s เมื่อความเร่งจากแรงโน้มถ่วง (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2 จงหาความเร็วเฉลี่ยในการไหลของน้ำมันในแนวแกน z ($v_{z,avg}$) เมื่อ $v_{z,avg} = \frac{\int_0^W \int_0^\delta v_z dxdy}{\delta W} = \frac{W\int_0^\delta v_z dx}{\delta W} = \frac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta}$ ด้วยวิธีการหาพื้นที่แบบริชาร์ดสัน เมื่อความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm

วิธีทำ

จาก $v_z = \frac{\rho g \delta^2}{2\mu}\left[1 - \left(\frac{x}{\delta}\right)^2\right]$ เมื่อแทนค่าความหนาของชั้นน้ำมัน (δ) มีค่าเท่ากับ 2.0 mm ความกว้างของท่อ (W) มีค่าเท่ากับ 10 mm ความหนาแน่นของน้ำมัน (ρ) มีค่าเท่ากับ 820 kg/m^3 ความหนืดของน้ำมัน (μ) มีค่าเท่ากับ 0.20 Pa.s และความเร่งจากแรงโน้มถ่วง (g) มีค่าเท่ากับ 9.8 m/s^2

$$v_z = \left[\frac{820 \times 9.8 \times (0.002)^2}{2(0.2)}\right]\left[1 - \left(\frac{x}{0.002}\right)^2\right] = 0.08036\left[1 - 2.5x10^5 x^2\right]$$

การหาพื้นที่ด้วยวิธีริชาร์ดสันเป็นการประยุกต์การหาพื้นที่ด้วยกฎสี่เหลี่ยมคางหมูที่แบ่งช่วงออกเป็นจำนวน n ช่วง โดย h_1 คือแบ่งเป็น 1 ช่วง และ h_2 คือแบ่งออกเป็น 2 ช่วง ดังนั้นจึงจำเป็นต้องหาพื้นที่ของ $I(h_1)$ และ $I(h_2)$ ก่อน

ขั้นที่ 1 หาพื้นที่ของ $I(h_1)$ โดย h_1 คิดจาก $x = 0$ m ถึง $x = 2\times10^{-3}$ m ดังนั้น $h_1 = \frac{2\times10^{-3} - 0}{1} = 2\times10^{-3}$ m จะได้ $x_0 = 0$ m และ $x_1 = 2\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1 - 2.5x10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1 - 2.5x10^5(2x10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

$$I(h_1) = \frac{h_1}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right] = \frac{2\times10^{-3}}{2}\left[0.08036 + 0\right] = 8.036\times10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

ขั้นที่ 2 หาพื้นที่ของ $I(h_2)$ โดย h_2 คิดจาก $x = 0$ m ถึง $x = 2x10^{-3}$ m ดังนั้น $h_2 = \frac{2\times10^{-3} - 0}{2} = 1\times10^{-3}$ m จะได้ $x_0 = 0$ m, $x_1 = 1\times10^{-3}$ m และ $x_2 = 2\times10^{-3}$ m

ดังนั้นคำนวณได้เป็น

จุดที่ $x_0 = 0$ m ได้ $v_{z0} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(0)^2\right] = 0.08036$ m/s

จุดที่ $x_1 = 1\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z1} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(1x10^{-3})^2\right] = 0.06027$ m/s

จุดที่ $x_2 = 2\times10^{-3}$ m ได้ $v_{z2} = 0.08036\left[1-2.5x10^5(2x10^{-3})^2\right] = 0$ m/s

เมื่อแทนลงในสมการ (7.8) ได้เป็น

$$I(h_2) = \frac{h_2}{2}\left[f(x_0)+2f(x_1)+f(x_2)\right] = \frac{1x10^{-3}}{2}\left[0.08036+2(0.06027)+0\right] = 1.0045x10^{-4}\ \text{m}^2/\text{s}$$

จากสูตรวิธีการหาพื้นที่แบบริชาร์ดสัน

$$I = \frac{4}{3}I(h_2) - \frac{1}{3}I(h_1)$$

$$I = \frac{4}{3}I(h_2) - \frac{1}{3}I(h_1) = \frac{4}{3}(1.0045\times10^{-4}) - \frac{1}{3}(8.036\times10^{-5}) = 1.3393\times10^{-4} - 2.6787\times10^{-5}$$

$$I = 1.07143\times10^{-4}\ \text{m}^2/\text{s}$$

ดังนั้น $v_{z,avg} = \dfrac{\int_0^\delta v_z dx}{\delta} = \dfrac{1.07143\times10^{-4}}{2x10^{-3}} = 0.05357$ m/s

เมื่อเปรียบเทียบกับความเร็วในการไหลของน้ำมันในแนวแกน z หาพื้นที่ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด 1 ครั้ง ซึ่งได้ค่าเท่ากับ 5.3601x10^{-2}m/s ซึ่งจะเห็นได้ว่ามีค่าใกล้เคียงกัน

7.5 การหาค่าอินทิกรัลสองชั้น

ตัวอย่างสมการ $I = \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ หรือ $I = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy\right)dx$ สามารถประยุกต์การหาพื้นที่ใต้กราฟตามวิธีดังที่กล่าวมาแล้ว โดยมีหลักการคำนวณดังรูปที่ 7.6 โดยใช้กฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสามในการหาพื้นที่ใต้กราฟ จากรูปที่ 7.6 มีขั้นตอนในการคำนวณการหาพื้นที่ใต้กราฟของ $I = \int_c^d \left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ ซึ่งจะเห็นว่า $\int_a^b f(x,y)dx$ จำเป็นต้องทำการหาพื้นที่ใต้กราฟส่วนนี้ก่อน แล้วจึงหาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน y ต่อไป

ขั้นที่ 1. หาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x จากรูปที่ 7.6 พบว่า y มีทั้งหมด 3 จุด ดังนี้

ที่ $y = y_0$ พื้นที่ใต้กราฟ $I_{x,y_0} = \dfrac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_0)+4f(x_1,y_0)+f(x_2,y_0)\right]$

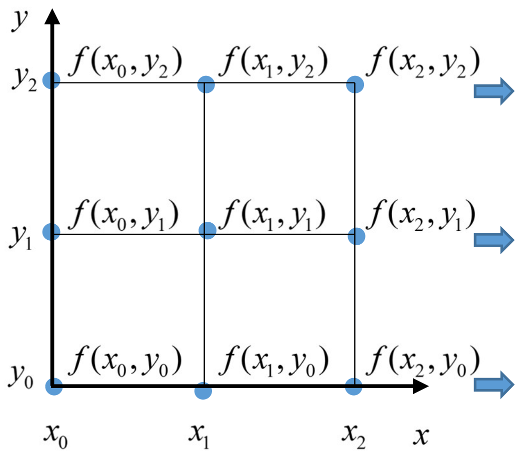
ที่ $y = y_1$ พื้นที่ใต้กราฟ $I_{x,y_1} = \dfrac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_1)+4f(x_1,y_1)+f(x_2,y_1)\right]$

ที่ $y = y_2$ พื้นที่ใต้กราฟ $I_{x,y_2} = \dfrac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_2)+4f(x_1,y_2)+f(x_2,y_2)\right]$

ขั้นที่ 2. หาพื้นใต้กราฟในแนวแกน y จากรูปที่ 7.6 เมื่อหาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x ได้ทั้ง 3 ค่าเรียบร้อยแล้ว นำพื้นที่ใต้กราฟในแต่ละจุดในแนวแกน y มาหาพื้นที่ใต้กราฟ

$$I_{x,y} = \frac{(\mathrm{y}_2-y_0)}{6}\left[I_{x,y_0}+4I_{x,y_1}+I_{x,y_0}\right]$$

จากรูปที่ 7.6 จะเห็นได้ว่าเป็นการคำนวณหาค่า $I=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ ในทางกลับกันถ้าต้องการหาค่าของ $I=\int_a^b\left(\int_c^d f(x,y)dy\right)dx$ ก็ทำการคำนวณในทำนองเดียวกันแต่เริ่มต้นจากการหาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน y ก่อน แล้วจึงหาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x



$$I_{x,y_2}=\frac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_2)+4\left(f(x_1,y_2)\right)+f(x_2,y_2)\right]$$

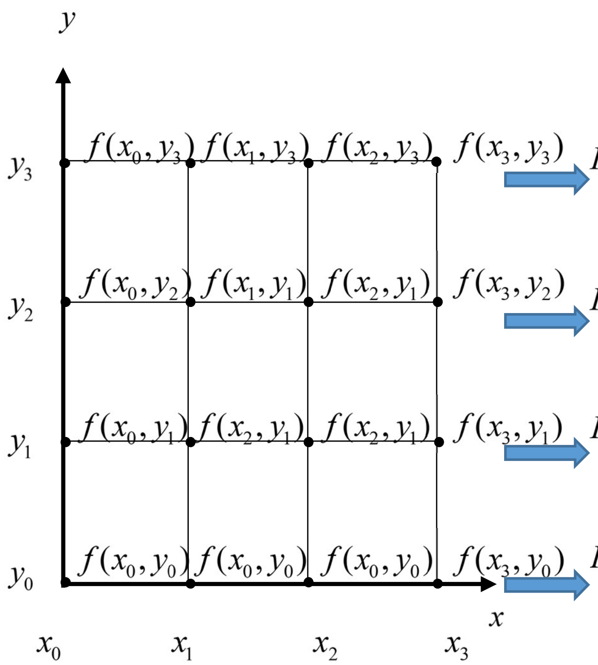
$$I_{x,y_1}=\frac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_1)+4\left(f(x_1,y_1)\right)+f(x_2,y_1)\right]$$

$$I_{x,y_0}=\frac{(x_2-x_0)}{6}\left[f(x_0,y_0)+4\left(f(x_1,y_0)\right)+f(x_2,y_0)\right]$$

$$I_{x,y}=\frac{(y_2-y_0)}{6}\left[I_{x,y_0}+4\left(I_{x,y_1}\right)+I_{x,y_2}\right]$$

รูปที่ 7.6 ขั้นตอนการหาค่าของ $I=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ ด้วยกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม

รูปที่ 7.7 เป็นขั้นตอนการหาค่าของ $I=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด ซึ่งมีลำดับการคำนวณเช่นเดียวกัน



$$I_{x,y_3}=\frac{(x_3-x_0)\times 3}{8}\left[\begin{array}{l} f(x_0,y_3)+3(f(x_1,y_3)) \\ +3(f(x_2,y_3))+f(x_3,y_3)\end{array}\right]$$

$$I_{x,y_2}=\frac{(x_3-x_0)\times 3}{8}\left[\begin{array}{l} f(x_0,y_2)+3(f(x_1,y_2)) \\ +3(f(x_2,y_2))+f(x_3,y_2)\end{array}\right]$$

$$I_{x,y_1}=\frac{(x_3-x_0)\times 3}{8}\left[\begin{array}{l} f(x_0,y_1)+3(f(x_1,y_1)) \\ +3(f(x_2,y_1))+f(x_3,y_1)\end{array}\right]$$

$$I_{x,y_0}=\frac{(x_3-x_0)\times 3}{8}\left[\begin{array}{l} f(x_0,y_0)+3(f(x_1,y_0)) \\ +3(f(x_2,y_0))+f(x_3,y_0)\end{array}\right]$$

$$I_{x,y}=\frac{(y_3-y_0)\times 3}{8}\left[I_{x,y_0}+3(I_{x,y_1})+3(I_{x,y_2})+I_{x,y_3}\right]$$

รูปที่ 7.7 ขั้นตอนการหาค่าของ $I=\int_c^d\left(\int_a^b f(x,y)dx\right)dy$ ด้วยกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด

ตัวอย่าง 7.4 จงหาอัตราการระบายความร้อนของแผ่นระบายความร้อน (η) ด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดเมื่อคำนวณ 2 ช่วงทั้งในแนวแกน x และ แนวแกน y อัตราการระบายความร้อนของแผ่นระบายความร้อนดังสมการ (E7.3-1)

$$\eta=\int_0^W\int_0^L h(T_x-T_\infty)dxdy \qquad \text{(E7.3-1)}$$

กำหนดให้ T_∞ มีค่าเท่ากับ 50 °C และ h มีค่าเท่ากับ 100 W/m^2-°C เมื่อ y คือความกว้างของแผ่นระบายความร้อน 0.02 m และ x คือความยาวของแผ่นระบายความร้อน 0.1 m เมื่อ $T_x=yT_b-(T_\infty-T_b)e^{-kx}$ k มีค่าเท่ากับ 12.99, T_b มีค่าเท่ากับ 500 °C

วิธีทำ

โจทย์กำหนดให้ทำการคำหาค่านวณอัตราการระบายความร้อนของแผ่นระบายความร้อนด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดเมื่อคำนวณ 2 ช่วง ดังนั้นจึงคำนวณหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด 2 ครั้ง โดยแต่ละครั้งจะใช้จำนวนจุด 4 จุด และมี 3 ช่วงย่อย ดังนั้นถ้าต้องการคำนวณด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดเมื่อคำนวณ 2 ช่วง แปลว่าจำเป็นต้องใช้จุดทั้งหมด 7 จุด ดังแสดงในรูปที่ E7.4-1

ดังนั้นแกน x มีค่าระหว่าง 0 m ถึง 0.1 m ต้องมีจุดอยู่ 7 จุด ระยะห่างของแต่ละจุดในแนวแกน x คือ

$$h_x=\frac{0.1-0}{6}=1.67\times 0^{-2} \text{ m}$$

และแกน y มีค่าระหว่าง 0 m ถึง 0.02 m ต้องมีจุดอยู่ 7 จุด ระยะห่างของแต่ละจุดในแนวแกน y คือ $h_y = \dfrac{0.02-0}{6} = 3.33\times10^{-3}$ m

จากรูปที่ E7.4-1 เมื่อหาค่าของ $f(T)=h(T_x - T_\infty)$ เมื่อ $T_x = yT_b - (T_\infty - T_b)e^{-kx}$ เมื่อแทนค่าได้เป็นสมการ (E7.4-1)

$$f(T)=h(T_x - T_\infty)=h(yT_b-(T_\infty - T_b)e^{-kx}-T_\infty) \qquad \text{(E7.4-2)}$$

เมื่อแทนค่า T_α มีค่าเท่ากับ 50 °C และ h มีค่าเท่ากับ 100 W/m^2-°C k มีค่าเท่ากับ 12.99 และ T_b มีค่าเท่ากับ 500 °C ได้เป็นสมการ (E7.4-2)

$$f(T)=100\left[y(500)-(50-500)e^{-12.99x}-50\right]=100\left[500y+450e^{-12.99x}-50\right] \qquad \text{(E7.4-2)}$$

เมื่อคำนวณหาค่าของ $f(T)$ ที่จุด x และ y ต่าง ๆ ได้ดังรูปที่ E7.4-1

ตัวอย่างการหาค่า $f(T)$ ที่จุดต่างๆ

ที่จุด $x=0$ m และ $y=0$ m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99(0)}-50\right]=100\left[0+450e^{0}-50\right]=100[450-50]=4.00\times10^{4}$$

ที่จุด $x=1.67\times10^{-2}$ m และ $y=0$ m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99(1.67\times10^{-2})}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(1.67\times10^{-2}\right)}-50\right]$$
$$=100[362.24-50]=3.12\times10^{4}$$

ที่จุด $x=3.33\times10^{-2}$ m และ $y=0$m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99(3.33\times10^{-2})}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(3.33\times10^{-2}\right)}-50\right]$$
$$=100[291.98-50]=2.42\times10^{4}$$

ที่จุด $x=5.00\times10^{-2}$ m และ $y=0$m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99\left(5.00\times10^{-2}\right)}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(5.00\times10^{-2}\right)}-50\right]$$
$$=100[235.04-50]=1.85\times10^{4}$$

ที่จุด $x=6.67\times10^{-2}$ m และ $y=0$m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99\left(6.67\times10^{-2}\right)}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(6.67\times10^{-2}\right)}-50\right]$$
$$=100[189.20-50]=1.39\times10^{4}$$

ที่จุด $x=8.33\times10^{-2}$ m และ $y=0$m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99\left(8.33\times10^{-2}\right)}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(8.33\times10^{-2}\right)}-50\right]$$
$$=100[152.50-50]=1.02\times10^{4}$$

ที่จุด $x=1\times10^{-1}$ m และ $y=0$m

$$f(T)=100\left[0(500)+450e^{-12.99\left(1\times10^{-1}\right)}-50\right]=100\left[0+450e^{-12.99\left(1\times10^{-1}\right)}-50\right]$$
$$=100\left[122.76-50\right]=7.28\times10^{3}$$

ส่วนจุดอื่นทำการคำนวณเช่นเดียวกัน ซึ่งให้ผลการคำนวณดังรูปที่ E7.4-1 จากรูปที่ E7.4-1 เนื่องจากใช้วิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดเมื่อคำนวณ 2 ช่วง ดังนั้นจะมีพื้นที่แบ่งได้เป็น 4 พื้นที่ คือ 1. $I_{x0-x3,y0-y3}$ 2 $I_{x3-x6,y0-y3}$ 3 $I_{x0-x3,y3-y6}$ และ 4 $I_{x3-x6,y3-y6}$

วิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดมีสูตรดังนี้

$$I=\frac{3h}{8}\left[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)\right]$$

เมื่อ $h_x=1.67x10^{-2}$ m และ $h_y=3.33x10^{-3}$ m

1. หาพื้นที่ $I_{x0-x3,y0-y3}$

ขั้นที่ 1 หาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x จาก $x=0$ m ถึง $x=5.00\times10^{-2}$ m ที่ $y=0$ m

$$I_{x0-x3,y0}=\frac{3h_x}{8}\left[T(0,0)+3T(1,0)+3T(2,0)+T(3,0)\right]$$

$$I_{x_0-x_3,y_0}=\frac{3\times(1.67\times10^{-2})}{8}\left[4.00\times10^{4}+3(3.12\times10^{4})+3(2.42\times10^{4})+1.85\times10^{4}\right]=1.41\times10^{3}$$

ขั้นที่ 2 หาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x จาก $x=0$ m ถึง $x=5.00\times10^{-2}$ m ที่ $y=3.33\times10^{-3}$ m

$$I_{x0-x3,y1}=\frac{3h_x}{8}\left[T(0,1)+3T(1,1)+3T(2,1)+T(3,1)\right]$$

$$I_{x_0-x_3,y_1}=\frac{3\times(1.67\times10^{-2})}{8}\left[4.02\times10^{4}+3(3.14\times10^{4})+3(2.44\times10^{4})+1.87\times10^{4}\right]=1.42\times10^{3}$$

ขั้นที่ 3 หาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x จาก $x=0$ m ถึง $x=5.00\times10^{-2}$ m ที่ $y=6.66\times10^{-3}$ m

$$I_{x0-x3,y2}=\frac{3h_x}{8}\left[T(0,2)+3T(1,2)+3T(2,2)+T(3,2)\right]$$

$$I_{x_0-x_3,y_2}=\frac{3\times(1.67\times10^{-2})}{8}\left[4.03\times10^{4}+3(3.16\times10^{4})+3(2.45\times10^{4})+1.88\times10^{4}\right]=1.42\times10^{3}$$

ขั้นที่ 4 หาพื้นที่ใต้กราฟในแนวแกน x จาก $x=0$ m ถึง $x=5.00\times10^{-2}$ m ที่ $y=1.00\times10^{-2}$ m

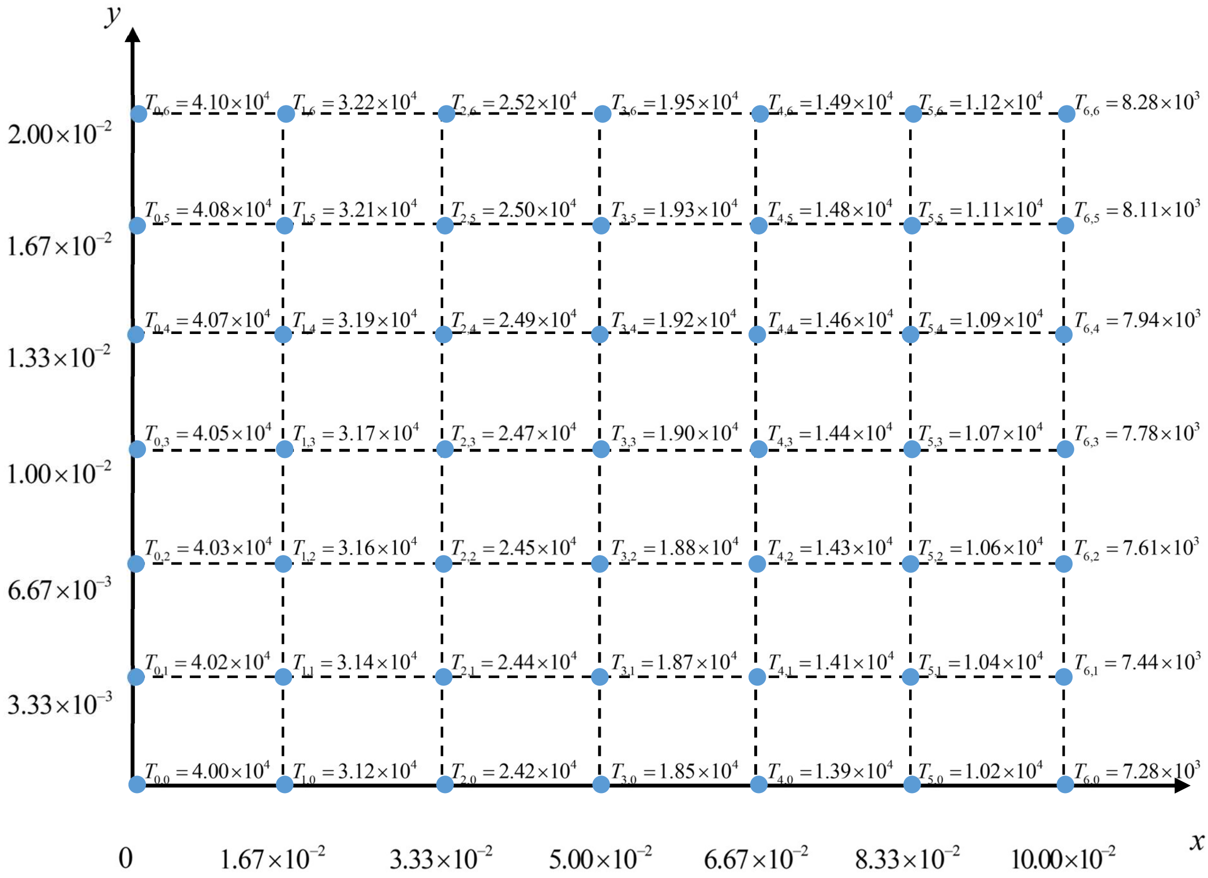
$$I_{x0-x3,y3}=\frac{3h_x}{8}\left[T(0,3)+3T(1,3)+3T(2,3)+T(3,3)\right]$$

$$I_{x_0-x_3,y_3}=\frac{3\times(1.67\times10^{-2})}{8}\left[4.05\times10^{4}+3(3.17\times10^{4})+3(2.47\times10^{4})+1.90\times10^{4}\right]=1.43\times10^{3}$$

ขั้นที่ 5 นำพื้นที่ตั้งแต่ขั้นที่ 1 ถึงขั้นที่ 4 มาหาพื้นที่ในแนวแกน y จาก $y=0.00$ m ถึง $y=1.00\times10^{-2}$ m

$$I_{x0-x3,y0-y3}=\frac{3h_y}{8}\left[I_{x0-x3,y0}+3I_{x0-x3,y1}+3I_{x0-x3,y2}+I_{x0-x3,y3}\right]$$

$$I_{x_0-x_3,y_0-y_3}=\frac{3\times(3.33\times10^{-3})}{8}\left[1.41\times10^{3}+3\left(1.42\times10^{3}\right)+3\left(1.42\times10^{3}\right)+1.43\times10^{3}\right]=14.2$$



รูปที่ E7.4-1 ผลการการคำนวณค่าของ $f(T)$ ที่จุดต่างๆ

สำหรับพื้นที่ของ $I_{x0-x3,y0-y3}$ $I_{x3-x6,y0-y3}$ $I_{x0-x3,y3-y6}$ และ $I_{x3-x6,y3-y6}$ สามารถหาได้ทำนองเดียวกันกับการหาพื้นที่ของ $I_{x0-x3,y0-y3}$ จากการคำนวณพบว่า $I_{x3-x6,y0-y3}$ $I_{x0-x3,y3-y6}$ และ $I_{x3-x6,y3-y6}$ มีค่าเท่ากับ6.27 ,14.44 และ 6.53 ตามลำดับ ดังนั้นอัตราการระบายความร้อนของแผ่นระบายความร้อน (η) ด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปดสามารถหาได้ดังนี้

$$\eta = I_{x0-x3,y0-y3} + I_{x3-x6,y0-y3} + I_{x0-x3,y3-y6} + I_{x3-x6,y3-y6}$$

$$\eta = 14.19 + 6.27 + 14.44 + 6.53 = 41.43$$

7.6 แบบฝึกหัด

HM7.1 ประชากรของแบคทีเรียที่ตำแหน่ง (x,y) เป็นฟังก์ชันดังต่อไปนี้ $f(x,y)=\dfrac{10000e^{y}}{1+0.5|x|}$ เมื่อ f(x,y) เป็นจำนวนประชากรของแบคทีเรียที่ตำแหน่ง (x,y) จงหาจำนวนประชากรของแบคทีเรียเมื่อระยะของ x เป็น $-5\le x\le 5$ และระยะของ y เป็น $-2\le y\le 0$ ด้วยวิธีการหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยวิธีกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด เมื่อแบ่งพื้นที่ในแนวแกน x และแกน y เป็น 2 ช่วง

HM7.2 ปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลสำหรับปฏิกิริยา $A\rightarrow B+C$ สามารถคำนวณได้จากสมการต่อไปนี้ $V_{PFR}=F_{A0}\int_{0}^{x_A}\dfrac{(1+0.5x_A)^2}{kC_{A0}^2(1-x_A)^2}dx_A$ เมื่อ V_{PFR} คือปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล (L), F_{A0} คืออัตราการไหลเชิงโมลของสาร A (mol/h) C_{A0} คือความเข้มข้นของสาร A ที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (mol/L) k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (L/mol-h) และ x_A คือคอนเวอร์ชันของสาร A จงหาปริมาตรของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลที่คอนเวอร์ชันของสาร A เท่ากับ 0.8 เมื่ออัตราการไหลเชิงโมลของสาร A เท่ากับ 100 mol/h ความเข้มข้นของสาร A ที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์เท่ากับ 1 mol/L และค่าคงที่ปฏิกิริยาเท่ากับ 0.01 L/mol-hr โดยใช้วิธีต่อไปนี้

วิธีการของริชาร์ดสัน

วิธีสี่เหลี่ยมคางหมู 6 ครั้ง

วิธีการของกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม 2 ครั้ง

วิธีการของกฎของซิมป์สันแบบสามส่วนแปด 1 ครั้ง

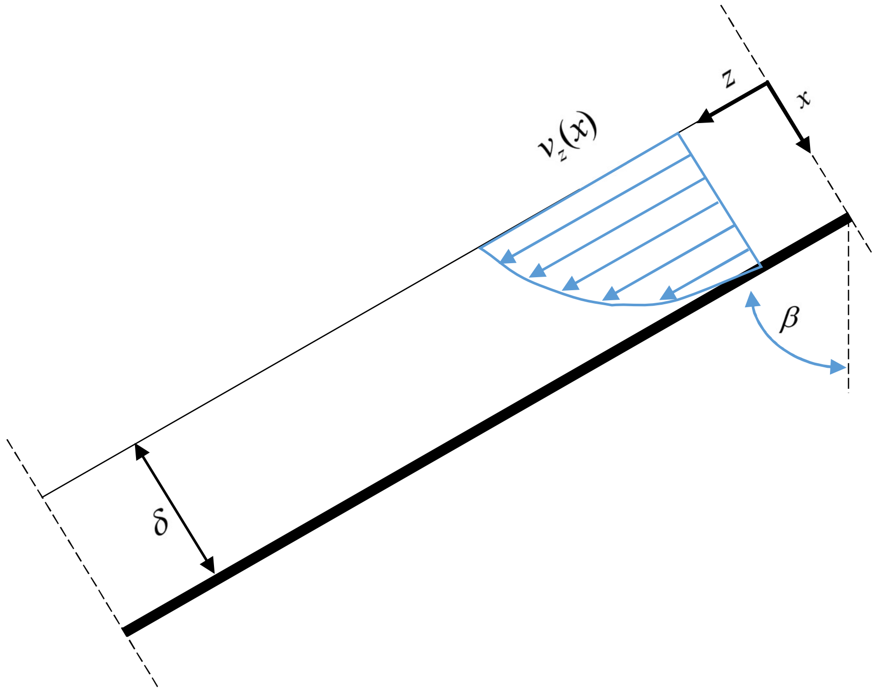
HM7.3 จงหาค่า $\int_{-1}^{1}\int_{0}^{2}(1-6x^2y)dxdy$ ด้วยวิธีดังต่อไปนี้ด้วยวิธี

1. วิธีการหาพื้นที่ใต้กราฟด้วยวิธีวิธีสี่เหลี่ยมคางหมูเมื่อ h เท่ากับ 0.5 ทั้งแกน x และ แกน y
2. วิธีการหาพื้นที่ใต้กราฟเมื่อทำวิธีการของกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสาม 2 ครั้ง ทั้งแกน x และแกน y

HM7.4 จงหาอัตราการไหลเชิงมวลของชั้นฟิล์มน้ำมันที่ไหลบนระนาบเอียง (β) 30 องศา ดังรูปที่ HM7.4-1 เมื่อชั้นฟิล์มมีความหนา (δ) 10 มิลลิเมตร และความกว้างของแผ่นระนาบ (y) 10 มิลลิเมตร สมการ (HM7.4-1) เป็นสมการแสดงอัตราการไหลเชิงมวลของชั้นฟิล์มน้ำมันที่ไหลบนระนาบเอียง

$$w=\int_{0}^{y}\int_{0}^{\delta}\rho v_z dxdy \qquad \text{(HM7.4-1)}$$

เมื่อ $v_z=\dfrac{\rho g\delta^2\cos\beta}{2\mu}\left[1-\left(\dfrac{x}{\delta}\right)^2\right]$ กำหนดให้ความหนาแน่นของน้ำมัน (ρ)เท่ากับ 800 kg/m^3 ความเร่งเนื่องจากแรงโน้มถ่วงของโลก (g) เท่ากับ 9.81 m/s^2 ความหนืดของน้ำมัน (μ) เท่ากับ 10x10^{-4} m^2/s ด้วยวิธี 1.สี่เหลี่ยมคางหมู เมื่อ Δx = Δy = 2.5 โดยคำนวณ 2 ครั้ง และด้วยวิธีการของกฎของซิมป์สันแบบหนึ่งส่วนสามโดยคำนวณ 2 ครั้ง



HM7.4-1 ลักษณะการไหลของชั้นฟิล์มบนระนาบเอียง

7.7 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot, Transport phenomena (Second Edition), New York : J. Wiley, 2002

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 11

หัวข้อการสอน

บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า หัวข้อ 8.1 - 8.2

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญ
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าเริ่มต้น

เนื้อหา

1. บทนำ
2. การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าเริ่มต้น

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 12

หัวข้อการสอน

บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า หัวข้อ 8.3 - 8.4

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาผลเฉลยของปัญหาในระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ
2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าขอบด้วยวิธียิงเป้า

เนื้อหา

1. การหาผลเฉลยของปัญหาในระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ
2. การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าขอบด้วยวิธียิงเป้า

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง 10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ 120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา 50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 8 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญด้วยการประมาณค่า

8.1 บทนำ

การคำนวณทางวิศวกรรมเคมีหรือทางวิศวกรรมมักจะอธิบายอยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์สามัญดังที่ได้อธิบายในบทที่ 7 ดังนั้นในบทนี้จะเป็นการอธิบายวิธีการแก้สมการเชิงอนุพันธ์ด้วยวิธีการประมาณค่า ในการหาผลเฉลยของปัญหาที่อยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์สามัญสามารถแบ่งออกได้เป็น 2 ชนิด คือ ปัญหาค่าเริ่มต้น (Initail value problem) และปัญหาค่าขอบ (Boundary value problem)

8.2 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าเริ่มต้น

ตัวอย่างปัญหาหาค่าเริ่มต้นเช่น ปฏิกิริยาเคมี A $\longrightarrow$ B ในเครื่องปฏิกรณ์แบบกะ พบว่าอัตราการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของ A ดังสมการ (8.1)

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A \tag{8.1}$$

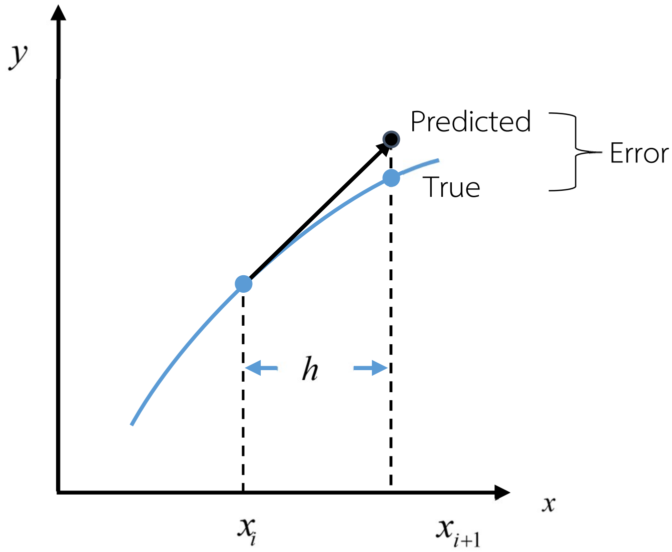
เมื่อ C_A คือความเข้มข้นของสาร A ในเครื่องปฏิกรณ์ (mol/L) t คือเวลาในการเกิดปฏิกิริยา (min) และ k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (min^{-1}) เมื่อเวลาเริ่มต้น $t = 0$ min ความเข้มข้นของสาร A ในเครื่องปฏิกรณ์มีค่าเท่ากับ C_{A0} mol/L จงหาความเข้มข้นของสาร A ในเครื่องปฏิกรณ์ เมื่อเวลาในการเกิดปฏิกิริยาเท่ากับ 10 min ซึ่งปัญหาลักษณะนี้เป็นปัญหาค่าเริ่มต้น จะเห็นว่าปัญหาลักษณะนี้ต้องการให้หาค่าผลเฉลยที่เวลา 10 min

การหาผลเฉลยของปัญหาค่าเริ่มต้นที่มีสมการเชิงอนุพันธ์ในการอธิบายสามารถหาได้ด้วยวิธีการผลเฉลยได้หลายรูปแบบ สำหรรับในหัวข้อนี้จะเป็นวิธีการหาผลเฉลยของปัญหาเริ่มต้นที่เป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งซึ่งมีรูปแบบสมการดังสมการ (8.2)

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{8.2}$$

8.2.1 วิธีการประมาณค่าของออยเลอร์

การหาผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์ (Euler's Method) เป็นวิธีประมาณค่าอย่างง่ายที่สุดของการแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง โดยอาศัยการประมาณค่าจากค่าของอนุพันธ์ที่จุดนั้นเพื่อไปหาค่าของฟังก์ชันในจุดถัดไปดังรูปที่ 8.1



รูปที่ 8.1 หลักการหาผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งด้วยการประมาณค่าของออยเลอร์

ที่มา: Chapra (2010)

จากรูปที่ 8.1 พบว่า $\frac{dy}{dx}$ หรือค่าความชันของเส้นโค้ง ณ จุดนั้น สามารถเขียนให้อยู่ในรูปสมการ (8.3)

$$\frac{dy}{dx} = \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} \tag{8.3}$$

ถ้า $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ ถ้าเริ่มจากจุด (x_1, y_1) ดังนั้นค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งคือ $f(x_1, y_1)$ ดังนั้นเพื่อหาค่าของ y_2 จากสมการ (8.3) ได้เป็นสมการ (8.4)

$$\frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{dy}{dx} = f(x_1, y_1)$$

$$y_2 - y_1 = f(x_1, y_1)(x_2 - x_1)$$

$$y_2 = y_1 + f(x_1, y_1)(x_2 - x_1) = y_1 + f(x_1, y_1)h \tag{8.4}$$

เมื่อ $h = x_2 - x_1$

ดังนั้นถ้าเริ่มจากจุด (x_i, y_i) ดังนั้นสมการ (8.4) ได้เป็นสมการ (8.5)

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h \tag{8.5}$$

เมื่อ $h = x_{i+1} - x_i$

การหาผลเฉลยของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์จะเกิดความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลาย (E_t) สามารถหาได้จากอนุกรมเทย์เลอร์ดังสมการ (8.6)

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2!} f''(x_i)(x_{i+1} - x_i)^2 + \ldots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_i)(x_{i+1} - x_i)^n + \ldots \tag{8.6}$$

เมื่อ $h = x_{i+1} - x_i$

$$y_{i+1} = y_i + y'_i h + \frac{1}{2!} y''_i h^2 + ... + \frac{1}{n!} y_i^{(n)} h^n + R_n ...$$

เมื่อ R_n คือผลรวมของพจน์ที่เหลือดังสมการ (8.7)

$$R_n = \frac{1}{(n+1)!} y_i^{(n+1)} h^{n+1} + \frac{1}{(n+2)!} y_i^{(n+2)} h^{n+2} + ... \qquad (8.7)$$

ถ้ากำหนดให้ $x_i < \xi < x_{i+1}$ และเมื่อแทนค่าลงในสมการ (8.7) จะทำให้ค่า R_n สามารถประมาณค่าได้ดังสมการ (8.8)

$$R_n = \frac{y_i^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1} \qquad (8.8)$$

ดังนั้นความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลายหาได้ดังสมการ (8.9)

$$E_t = y_{i+1} - (y_i + f(x_i, y_i)h)$$

เมื่อแทน $y_{i+1} = y_i + y'_i h + R_i(h)$ และ $y' = f(x_i, y_i)$ ดังนั้น

เมื่อ $R_i(h) = \frac{1}{2!} y''_i h^2 + \frac{1}{3!} y_i^{(3)} h^3 + \frac{1}{4!} y_i^{(4)} h^4 + ... + \frac{1}{n!} y_i^{(n)} h^n + ... = \frac{1}{2!} y''_i(\xi) h^2$

$$E_t = y_i + y'_i h + R_i(h) - (y_i + y'_i h) = R_i(h) = \frac{1}{2!} y''_i(\xi) h^2 \qquad (8.9)$$

ดังนั้นความคลาดเคลื่อนจากการประมาณค่าสามารถลดรูปจากค่าความคลาดเคลื่อนจากการตัดปลายได้เป็นสมการ (8.10) เนื่องจาก

$$E_a = \frac{1}{2!} y''_i h^2 = \frac{1}{2!} f'(x_i, y_i) h^2 \qquad (8.10)$$

ความคลาดเคลื่อนจากการประมาณค่าของออยเลอร์สามารถลดลงได้โดยการปรับค่าของ h ให้มีค่าลดลง

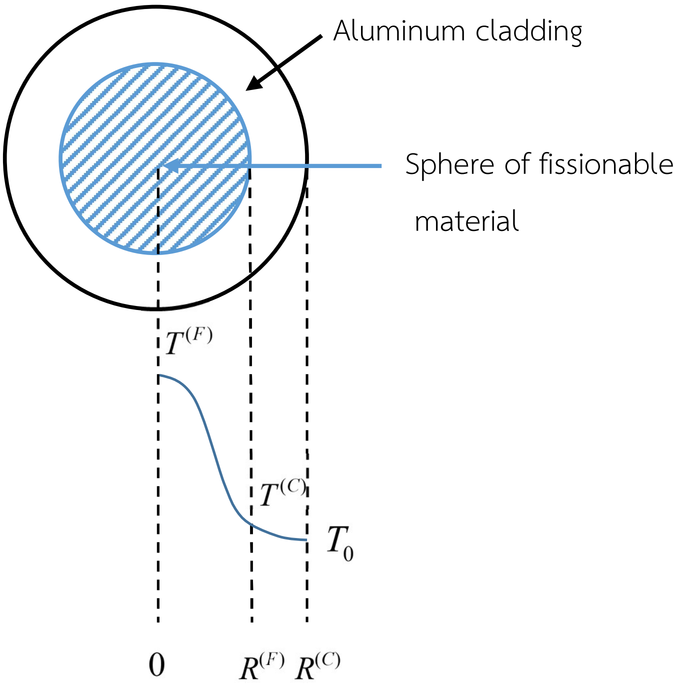
ตัวอย่าง 8.1 เตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ประกอบด้วยก้อนยูเรเนียมออกไซด์ที่ถูกหุ้มด้วยโลหะอะลูมิเนียมดังรูปที่ E8.1-1 จงหาอุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ที่ระยะรัศมี (r) เท่ากับ 0 2 4 6 8 และ 10 cm ด้วยการประมาณค่าของออยเลอร์ เมื่อสมการการถ่ายเทความร้อนเป็นดังสมการ (E8.1-1) สำหรับชั้นโลหะอะลูมิเนียม และ (E8.1-2) สำหรับก้อนยูเรเนียมออกไซด์

$$-k^C \frac{dT^C}{dr} = S_n \left(\frac{1}{3} + \frac{b}{5}\right) \frac{R_F^3}{r^2} \qquad (E8.1\text{-}1)$$

$$-k^F \frac{dT^F}{dr} = S_n \left(\frac{r}{3} + \frac{b}{R_F^2} \frac{r^3}{5}\right) \qquad (E8.1\text{-}2)$$

เมื่อ k^C และ k^F มีค่าเท่ากับ 6 และ 21.5 W/K-m, T^C และ T^F เป็นอุณหภูมิในชั้นยูเรเนียมออกไซด์และชั้นโลหะอะลูมิเนียม, R_F และ R_C เป็นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์และรัศมีของชั้นอะลูมิเนียมที่มีค่าเท่ากับ 6 และ 12 cm ตามลำดับ, ค่าคงที่ Sn และ b มีค่าเท่ากับ 4x10^6 W/m^3 และ 5 ตามลำดับ และที่รอยต่อระหว่างชั้นชั้นยูเรเนียมออกไซด์และชั้นของชั้นอะลูมิเนียม อุณหภูมิที่ผิวรอยต่อระหว่างชั้นต้องมีอุณหภูมิเท่ากัน (รัศมี

เท่ากับ 6 cm) หรือ $T^F = T^C$ และ $dT^F/dr = dT^C/dr$ และอุณหภูมิที่ผิวโลหะอะลูมิเนียม (r = 12 cm) เท่ากับ 500 K



รูปที่ E8.1-1 เตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ประกอบด้วยก้อนยูเรเนียมออกไซด์ที่ถูกหุ้มด้วยโลหะอะลูมิเนียม
ที่มา: Bird (2002)

วิธีทำ

เนื่องจากเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ประกอบด้วยก้อนยูเรเนียมออกไซด์ที่ถูกหุ้มด้วยโลหะอะลูมิเนียมและมีสมการสมการการถ่ายเทความร้อน 2 สมการดังนั้นในการประมาณค่าของออยเลอร์ของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งจะแบ่งออกเป็น 2 ช่วง คือ ช่วงที่หนึ่งจากรัศมี 6 cm ถึง 12 cm ซึ่งเป็นของชั้นโลหะอะลูมิเนียม และช่วงที่หนึ่งจากรัศมี 0 cm ถึง 6 cm ซึ่งเป็นของชั้นยูเรเนียมออกไซด์

เนื่องจากเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น ซึ่งทราบว่าอุณหภูมิที่ผิวโลหะอะลูมิเนียม (r = 12 cm) เท่ากับ 500 K และโจทย์ต้องการทราบอุณหภูมิที่รัศมีเท่ากับ 0 2 4 6 8 และ 10 cm ดังนั้นระยะห่างของ h จึงมีค่าเท่ากับ -2 cm เนื่องจากการคำนวณจะเริ่มต้นจากรัศมีเป็น 12 cm แล้วคำนวณไปที่ 10 8 6 4 2 และ 0 cm

ช่วงที่ 1 จากรัศมี 12 cm ไป 6 cm ในชั้นโลหะอะลูมิเนียม

เมื่อแทนค่าของรัศมีของชั้นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์มีค่าเท่ากับ 6 cm ค่าคงที่ Sn มีค่าเท่ากับ $4x10^6$ W/m^3 b เท่ากับ 5 และ k^C มีค่าเท่ากับ 6 W/K-m ได้เป็นสมการ (E8.1-3)

$$-6\frac{dT^C}{dr} = 4x10^6\left(\frac{1}{3}+\frac{5}{5}\right)\frac{(0.06)^3}{r^2}$$

$$\frac{dT^C}{dr} = -\frac{4x10^6}{6}\left(\frac{4}{3}\right)\frac{(0.12)^3}{r^2} = -\frac{192}{r^2} \qquad \text{(E8.1-3)}$$

เปลี่ยนให้อยู่ในรูปการการประมาณค่าของออยเลอร์ดังสมการ (E8.1-4)

$$T_{i+1}^C = T_i^C - \frac{192}{r_i^2} h$$

เมื่อ $h = -0.02$ m

คำนวณรอบที่ 1 เมื่อ $r_0 = 0.12$ m และ $T_0^C = 500$ K

$$r_1 = r_0 + h = 0.12 + (-0.02) = 0.10 \text{ m}$$

$$T_1^C = T_0^C - \frac{192}{r_0^2} h = 500 - \frac{192}{0.12^2}(-0.02) = 766.667 \text{ K}$$

คำนวณรอบที่ 2 เมื่อ $r_1 = 0.10$ cm และ $T_1^C = 766.667$ K

$$r_2 = r_1 + h = 0.10 + (-0.02) = 0.08 \text{ m}$$

$$T_2^C = T_1^C - \frac{192}{r_1^2} h = 766.667 - \frac{192}{0.10^2}(-0.02) = 1150.667 \text{ K}$$

คำนวณรอบที่ 3 เมื่อ $r_2 = 0.08$ cm และ $T_2^C = 1150.667$ K

$$r_3 = r_2 + h = 0.08 + (-0.02) = 0.06 \text{ m}$$

$$T_3^C = T_2^C - \frac{192}{r_2^2} h = 1150.667 - \frac{192}{0.10^2}(-0.02) = 1750.667 \text{ K}$$

ช่วงที่ 2 จากรัศมี 6 cm ไป 0 cm ในชั้นโลหะยูเรเนียมออกไซด์

เมื่อแทนค่าของรัศมีของชั้นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์มีค่าเท่ากับ 6 cm ค่าคงที่ S_n มีค่าเท่ากับ $4x10^6$ W/m^3 b เท่ากับ 5 และ k^F มีค่าเท่ากับ 21.5 W/K-m ได้เป็นสมการ (E8.1-5)

$$-k^F \frac{dT^F}{dr} = S_n\left(\frac{r}{3} + \frac{b}{R_F^2}\frac{r^3}{5}\right)$$

$$-21.5\frac{dT^F}{dr} = 4x10^6\left(\frac{r}{3} + \frac{5}{(0.06)^2}\frac{r^3}{5}\right)$$

$$\frac{dT^F}{dr} = -\frac{4x10^6}{21.5}\left(\frac{r}{3} + \frac{5}{(0.06)^2}\frac{r^3}{5}\right) = -6.2015\times10^4 r - 5.1679\times10^7 r^3 \qquad \text{(E8.1-5)}$$

เปลี่ยนให้อยู่ในรูปการการประมาณค่าของออยเลอร์ดังสมการ (E8.1-6)

$$T_{i+1}^F = T_i^F - \left(6.2015\times10^4 r_{in,i} + 5.1679\times10^7 r_{in,i}^3\right)h \qquad \text{(E8.1-6)}$$

เมื่อ $h = -0.02$ m

คำนวณรอบที่ 1 เมื่อ $r_{in,0} = 0.06$ m และ $T_0^F = T_3^C = 1750.667$ K

$$r_{in,1} = r_{in,0} + h = 0.06 + (-0.02) = 0.04 \text{ m}$$

$$T_1^F = T_0^F - \left(6.2015\times10^4 r_{in,0} + 5.1679\times10^7 r_{in,0}^3\right)h$$

$$T_1^F = 1750.667 - \left(6.2015\times10^4 \times 0.06 + 5.1679\times10^7 \times 0.06^3\right)(-0.02) = 2048.341 \text{ K}$$

คำนวณรอบที่ 2 เมื่อ $r_{in,1} = 0.04$ cm และ $T_1^F = 2048.341$ K

$$r_{in,2} = r_{in,1} + h = 0.04 + (-0.02) = 0.02 \text{ m}$$

$T_2^F = T_1^F - \left(6.2015\times10^4 r_{in,1} + 5.1679\times10^7 r_{in,1}^3\right)h$

$T_2^F = 1750.667 - \left(6.2015\times10^4 \times 0.04 + 5.1679\times10^7 \times 0.04^3\right)(-0.02) = 2164.103$ K

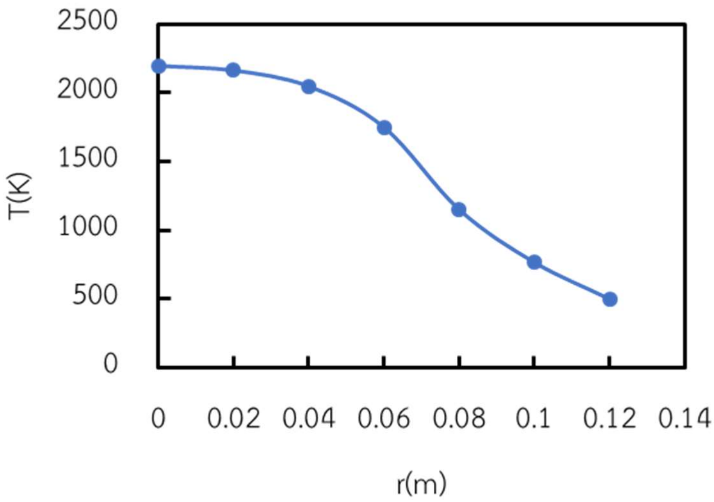
คำนวณรอบที่ 3 เมื่อ $r_{in,2} = 0.02$ cm และ $T_2^F = 2164.103$ K

$r_{in,3} = r_{in,2} + h = 0.02 + (-0.02) = 0$ m

$T_3^F = T_2^F - \left(6.2015\times10^4 r_{in,2} + 5.1679\times10^7 r_{in,2}^3\right)h$

$T_3^F = 2164.103 - \left(6.2015\times10^4 \times 0.02 + 5.1679\times10^7 \times 0.02^3\right)(-0.02) = 2197.178$ K

เมื่อนำค่าอุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่คำนวณได้ด้วยการประมาณค่าของออยเลอร์มาเขียนเป็นกราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิและระยะรัศมี ดังรูปที่ E8.1-2



รูปที่ E8.1-2 อุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ระยะรัศมีต่างๆ

8.2.2 วิธีการประมาณค่าของฮวน

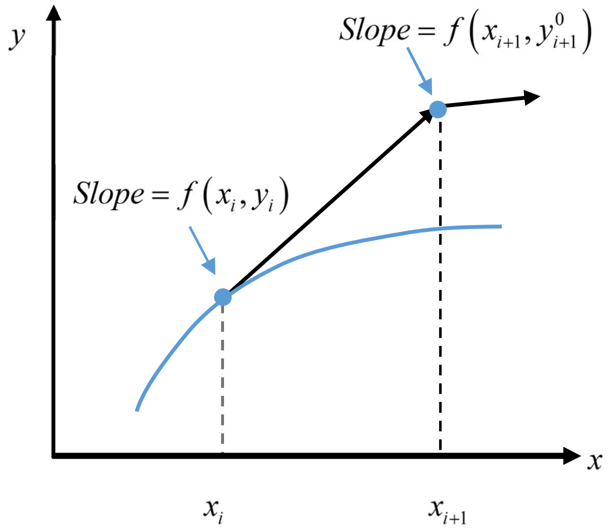
วิธีการประมาณค่าของฮวน (Heun’s Method) เป็นวิธีประมาณค่าที่ปรับปรุงมาจากวิธีประมาณค่าของออยเลอร์ โดยมีหลักการประมาณค่าดังรูปที่ 8.2 จากรูปที่ 8.2 วิธีการประมาณค่าของฮวนเป็นวิธีการหาค่าเฉลี่ยของค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งระหว่างจุด x_i และจุด x_{i+1} ดังนั้นวิธีการประมาณค่าของฮวนแบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอน

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า y_{i+1}^0 ด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์ ดังรูปที่ 8.2 (ก)

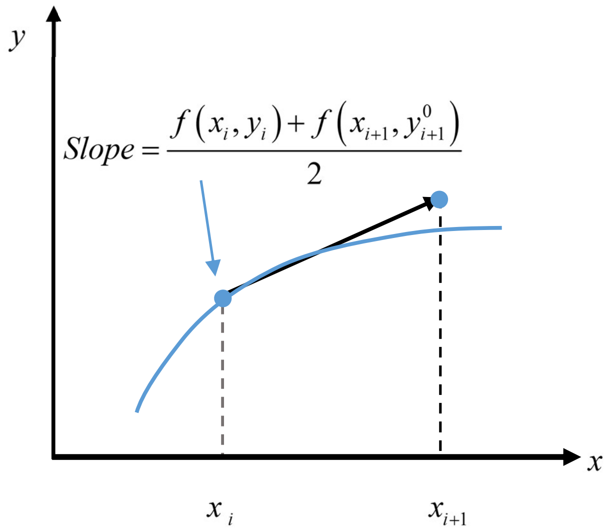
$y_{i+1}^0 = y_i + f(x_i, y_i)h$

ขั้นที่ 2 คำนวณหาค่าเฉลี่ยของอนุพันธ์ทั้งสองจุดเพื่อคำนวณหาค่า y_{i+1} ดังรูปที่ 8.2 (ข)

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}\left(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0) \right) h$$



(ก)



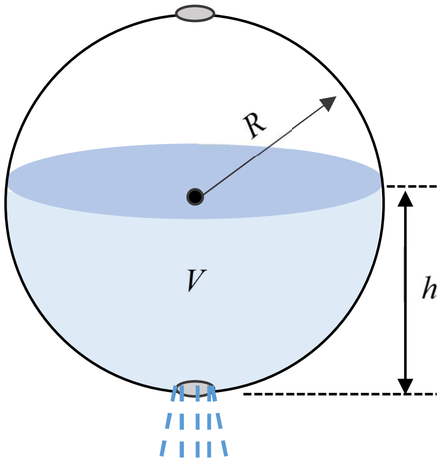
(ข)

รูปที่ 8.2 หลักการประมาณค่าของฮวน

ที่มา: Chapra (2010)

ตัวอย่าง 8.2 ถังทรงกลมที่มีรูก้นถัง ดังรูปที่ E8.2-1 พบว่าปริมาตรน้ำที่ไหลออกจากถังสามารถคำนวณได้จาก $Q_{out} = CA\sqrt{2gh}$ เมื่อ Q_{out} เป็นปริมาตรน้ำที่ไหลออกจากถัง (m^3/sec) C เป็นค่าคงตัว A เป็นพื้นที่หน้าตัดของรู (m^2) g คือค่าแรงโน้มถ่วงซึ่งเท่ากับ 9.81 m/s^2 และ h คือความสูงของของเหลวในถัง (m) จงหาเวลาที่

ทำให้น้ำในถังทรงกลมที่มีความสูง 2.75 m ไหลออกจากถังทรงกลมที่มีขนาด 3 m จนหมด เมื่อขนาดรูที่ก้นถังเท่ากับ 3 cm และ C เท่ากับ 0.55 ด้วยวิธีการประมาณค่าของฮวน



รูปที่ E8.2-1 ระดับความสูงของน้ำในถังทรงกลมที่มีรูก้นถัง
ที่มา: Chapra (2010)

วิธีทำ

ปริมาตรของเหลวในถังทรงกลมสามารถคำนวณได้จากสมการ (E8.2-1)

$$V = \frac{\pi h^2}{3}(3r - h) \qquad \text{(E8.2-1)}$$

เมื่อ V คือปริมาตรของของเหลวในถังทรงกลม r คือรัศมีของถังทรงกลม h คือความสูงของของเหลวในถังทรงกลม

จากสมการสมดุลปริมาตร

อัตราการเปลี่ยนแปลงปริมาตรของของเหลว = อัตราการไหลเข้าของของเหลว - อัตราการไหลออกของของเหลว

เนื่องจากไม่มีอัตราการไหลเข้าของของเหลวดังนั้น

อัตราการเปลี่ยนแปลงปริมาตรของของเหลว = - อัตราการไหลออกของของเหลว

อัตราการเปลี่ยนแปลงปริมาตรของของเหลว คือ $\frac{dV}{dt}$

อัตราการไหลออกของของเหลว คือ Q_{out}

ดังสมการ (E8.2-2)

$$\frac{dV}{dt} = Q_{out} \qquad \text{(E8.2-2)}$$

แต่เนื่องจากปริมาตรของของเหลวภายในถังมีค่าเท่ากับ $V = \frac{\pi h^2}{3}(3r - h) = \pi r h^2 - \frac{\pi h^3}{3}$ เนื่องจาก r เป็นรัศมีของถังทรงกลมซึ่งเป็นค่าคงที่ ดังนั้น

$$\frac{dV}{dt}=\frac{d}{dt}\left(\pi rh^2-\frac{\pi h^3}{3}\right)=2\pi rh\frac{dh}{dt}-\pi h^2\frac{dh}{dt}=\left(2\pi rh-\pi h^2\right)\frac{dh}{dt}$$

ดังนั้นสมการ (E8.2-2) ได้เป็นสมการ (E8.2-3)

$$\frac{dV}{dt}=\left(2\pi rh-\pi h^2\right)\frac{dh}{dt}=CA\sqrt{2gh} \qquad \text{(E8.2-3)}$$

จัดรูปสมการ (E8.2-3) ให้อยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์ดังสมการ (E8.2-4)

$$\frac{dh}{dt}=\frac{-CA\sqrt{2gh}}{(2\pi rh-\pi h^2)} \qquad \text{(E8.2-4)}$$

เนื่องจากโจทย์ต้องการทราบว่าที่หาเวลาที่ทำให้น้ำในถังทรงกลมที่มีความสูง 2.75 m ไหลจนหมด ดังนั้นจำเป็นต้องกลับสมการเพื่อให้ dh เป็นส่วนหาร ดังสมการ (E8.2-5)

$$\frac{dt}{dh}=-\frac{2\pi rh-\pi h^2}{CA\sqrt{2gh}}=\frac{\pi}{CA\sqrt{2g}}\left(2r\sqrt{h}-h\sqrt{h}\right) \qquad \text{(E8.2-5)}$$

เมื่อแทนค่า ถังทรงกลมที่รัศมี 3 m ขนาดรูที่ก้นถังเท่ากับ 3 cm C เท่ากับ 0.55 และ ค่าแรงโน้มถ่วงซึ่งเท่ากับ 9.81 m/s^2 ดังนั้น สมการ (E8.2-5) กลายเป็นสมการ (E8.2-6)

$$\frac{dt}{dh}=-\frac{\pi}{0.55(\pi x0.015^2)\sqrt{2x9.8}}\left(2x3x\sqrt{h}-h\sqrt{h}\right)=-1825.2685\left(6\sqrt{h}-\sqrt{h}\right) \qquad \text{(E8.2-6)}$$

ดังนั้นสมการการประมาณค่าด้วยวิธีการประมาณค่าของฮวน

$$t_{i+1}=t_i+\frac{1}{2}\left(f(h_i,t_i)+f(h_{i+1},t_{i+1}^0)\right)h$$

เนื่องจากเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น ซึ่งทราบว่าที่เวลาเริ่มต้น (t = 0 min) น้ำในถังทรงกลมที่มีความสูง 2.75 m และโจทย์ต้องการทราบจะต้องใช้เวลานานเท่าไรจึงทำให้ปริมาตรน้ำในถังเท่ากับ 0 m^3 ดังนั้นความสูงของระดับน้ำในถังจะมีค่าลดลง ดังนั้นให้ค่า h เท่ากับ -0.25 m

รอบที่ 1 เมื่อ $h_0=2.75$ m และ $t_0=0$ sec

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า t_1^0 เมื่อ $h_0=2.75$ m และ $t_0=0$ sec

$$h_1=h_0+h=2.75+(-0.25)=2.50 \text{ m}$$

$$f(h_0,t_0)=-1825.2685\left(6\sqrt{h_0}-h_0\sqrt{h_0}\right)=-1825.2685\left(6\sqrt{2.75}-2.75\sqrt{2.75}\right)=-9837.312$$

$$t_1^0=t_0+f(h_0,t_0)h=0+\left(-9837.312\right)(-2.5)=2459.3281 \text{ sec}$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหาค่า $f(h_1,t_1)$ t_1^0 เมื่อ $h_1=2.50$ m และ $t_1^0=2459.3281$ sec

$$h_1=h_0+h=2.75+(-0.25)=2.50 \text{ m}$$

$$f(h_1,t_1^0)=-1825.2685\left(6\sqrt{h_1}-h_1\sqrt{h_1}\right)=-1825.2685\left(6\sqrt{2.50}-2.50\sqrt{2.50}\right)=-10101.0101$$

ขั้นที่ 3 หาค่าเฉลี่ยของอนุพันธ์ทั้งสองจุดเพื่อคำนวณหาค่า t_1

$$t_1 = t_0 + \frac{1}{2}\left(f(h_0, t_0) + f(h_1, t_1^0) \right) h$$

เมื่อ $f(h_0,t_0) = -9837.312$ และ $f(h_1,t_1^0) = -10101.0101$

$$t_1 = 0 + \frac{1}{2}\left(-9837.3124 + (-10101.0101\right)(-0.25) = 2492.2903 \text{ sec}$$

รอบที่ 2 เมื่อ $h_1 = 2.50$ m และ $t_1 = 2492.2903$ sec

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า t_2^0 เมื่อ $h_1 = 2.50$ m และ $t_1 = 2492.2903$ sec

$$h_2 = h_1 + h = 2.50 + (-0.25) = 2.25 \text{ m}$$

$$f(h_1,t_1) = -1825.2685\left(6\sqrt{h_1} - h_1\sqrt{h_1}\right) = -1825.2685\left(6\sqrt{2.50} - 2.50\sqrt{2.50}\right) = -10101.0101$$

$$t_2^0 = t_1 + f(h_1,t_1)h = 2492.2903 + \left(-10101.0101\right)(-2.5) = 5017.5428 \text{ sec}$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหาค่า $f(h_2,t_2)$ t_2^0 เมื่อ $h_2 = 2.25$ m และ $t_2^0 = 5017.3281$ sec

$$h_2 = h_1 + h = 2.50 + (-0.25) = 2.25 \text{ m}$$

$$f(h_2,t_2^0) = -1825.2685\left(6\sqrt{h_2} - h_2\sqrt{h_2}\right) = -1825.2685\left(6\sqrt{2.25} - 2.25\sqrt{2.25}\right) = -10267.1353$$

ขั้นที่ 3 หาค่าเฉลี่ยของอนุพันธ์ทั้งสองจุดเพื่อคำนวณหาค่า t_2

$$t_2 = t_1 + \frac{1}{2}\left(f(h_1, t_1) + f(h_2, t_2^0) \right) h$$

เมื่อ $f(h_1,t_1) = -10101.0101$ และ $f(h_2,t_2^0) = -10267.1353$

$$t_2 = 2492.2903 + \frac{1}{2}\left(-10101.0101 + (-10267.1353\right)(-0.25) = 5038.3085 \text{ sec}$$

ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของฮวนในรอบที่ 3 ถึง 11 สามารถสรุปผลการคำนวณได้ตามตารางที่ E8.2-1 จากตารางที่ 8.2-1 พบว่าเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 11 ความสูงของปริมาตรน้ำในถังเท่ากับ 0 m พบว่าใช้เวลา 23849.667วินาที หรือ 397.50 นาที ประมาณ 7 ชม

ค่าคลาดเคลื่อนประมาณค่าสัมพัทธ์ (ε_a) มีค่า 0.00% ซึ่งได้ความลึกของรางน้ำเปิดที่มีรูปร่างเป็นสี่เหลี่ยมเท่ากับ 0.5967 m

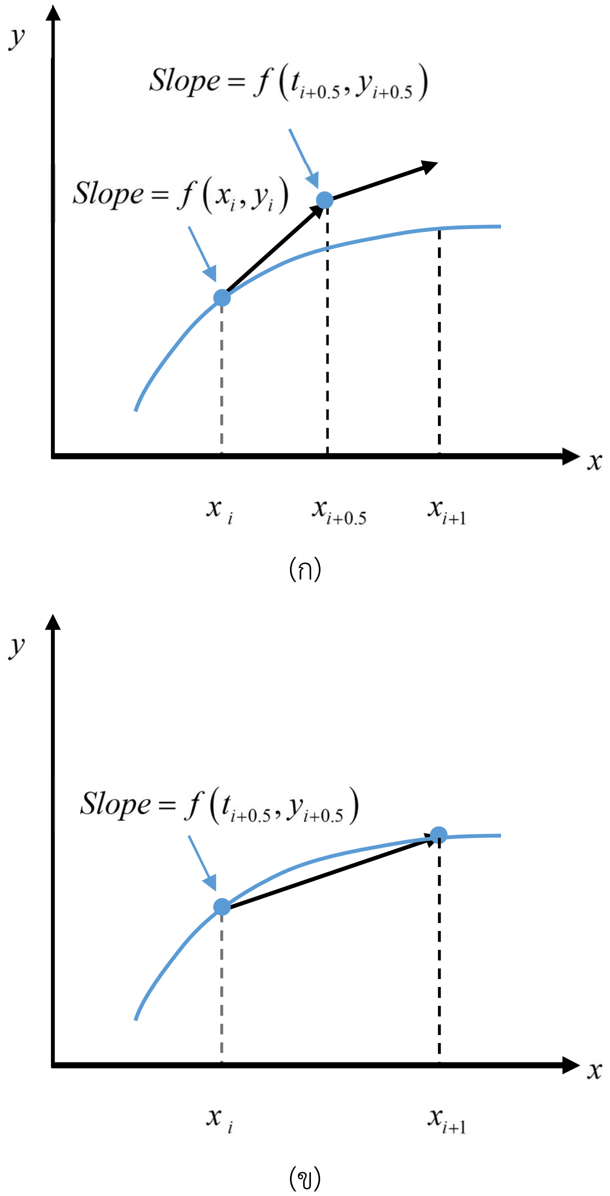
ตารางที่ E8.2-1 ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของฮวน

i	h_i	t_i	t_i^0	$f(h_i,t_i)$	$f(h_i,t_i^0)$
0	2.75	0			
1	2.50	2492.2903	2459.3281	-9837.3124	-10101.0101
2	2.25	5038.3085	5017.5428	-10101.0101	-10267.1353
3	2.00	7612.3601	7605.0923	-10267.1353	-10325.2778
4	1.75	10185.7778	10193.6796	-10325.2778	-10262.0638
5	1.50	12725.9979	12751.2938	-10262.0638	-10059.6970
6	1.25	15195.1329	15240.9222	-10059.6970	-9693.3830
7	1.00	17547.5986	17618.4787	-9693.3830	-9126.3425

i	h_i	t_i	t_i^0	$f(h_i,t_i)$	$f(h_i,t_i^0)$
8	0.75	19725.7447	19829.1842	-9126.3425	-8298.8266
9	0.50	21650.4266	21800.4514	-8298.8266	-7098.6285
10	0.25	23193.7111	23425.0838	-7098.6285	-5247.6469
11	0	23849.6669	24505.6228		

8.2.3 วิธีการประมาณค่าจากค่ากลาง

วิธีการประมาณค่าจากค่ากลาง (Midpoint Method) เป็นวิธีประมาณค่าที่ปรับปรุงมาจากวิธีประมาณค่าของออยเลอร์ แต่เปลี่ยนการหาค่าอนุพันธ์ที่จุด $x_{i+1/2}$ แทนโดยมีหลักการดังรูปที่ 8.3



รูปที่ 8.3 หลักการประมาณค่าจากค่ากลาง

ที่มา: Chapra (2010)

จากรูปที่ 8.3 วิธีการประมาณค่าจากค่ากลาง เป็นวิธีการใช้ค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่จุดกึ่งกลางระหว่าง ระหว่างจุด x_i และจุด x_{i+1} แทน ดังนั้นวิธีการประมาณค่าจากค่ากลางแบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอน

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า $y_{i+0.5}$ ด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์

$$y_{i+0.5} = y_i + f(x_i, y_i)\frac{h}{2}$$

ขั้นที่ 2 หาค่า y_{i+1} เมื่อ $x_{i+0.5} = x_i + 0.5h$

$$y_{i+1} = y_i + f(x_{i+0.5}, y_{i+0.5})h$$

ตัวอย่างที่ 8.3 ความสูงของน้ำในสระที่เกิดจากการระบายน้ำผ่านท่อระบายน้ำจากสระออกไปสู่ลำคลองพบว่าความสูงของน้ำในสระมีความสัมพันธ์กับเวลาดังนี้ $\frac{dh}{dt} = -\frac{\pi d^2}{4A(h)}\sqrt{2g(h+e)}$ เมื่อ h คือความสูงของระดับน้ำจากก้นสระ (m) t คือเวลา (s) d คือเส้นผ่านศูนย์กลางของท่อระยายน้ำ (m) A(h) เป็นพื้นที่หน้าตัดของน้ำในสระน้ำที่ระดับความลึกต่างๆ (m^2) g คือค่าแรงโน้มถ่วงซึ่งเท่ากับ 9.81 m/s^2 e คือระดับความลึกของท่อระบายน้ำจากก้นสระ (m) จงหาเวลาที่ใช้ในการระบายน้ำจนหมดสระ เมื่อความลึกของน้ำในสระที่เวลาเริ่มต้นเป็น 6 m เส้นผ่านศูนย์กลางของท่อระบายน้ำเป็น 0.25 m และความลึกของท่อระบายน้ำจากก้นสระเป็น 1 m โดยใช้ข้อมูลพื้นที่หน้าตัดของน้ำในสระน้ำที่ระดับความลึกของน้ำต่างๆจากตารางที่ E8.3-1

ตารางที่ E8.3-1 ข้อมูลพื้นที่หน้าตัดของน้ำในสระน้ำที่ระดับความสูงของน้ำจากก้นสระต่างๆ

h, m	6	5	4	3	2	1	0
A(h), m^2	1.17	0.97	0.67	0.45	0.32	0.18	0

วิธีทำ

เนื่องจากโจทย์ต้องการทราบว่าเวลาที่ใช้ในการระบายน้ำจนหมดสระ ดังนั้นจำเป็นต้องกลับสมการได้เป็นสมการ (E8.3-1)

$$\frac{dt}{dh} = -\frac{4A(h)}{\pi d^2\sqrt{2g(h+e)}} \qquad \text{(E8.3-1)}$$

เมื่อแทนค่าแรงโน้มถ่วงซึ่งเท่ากับ 9.81 m/s^2 เส้นผ่านศูนย์กลางของท่อระบายน้ำเป็น 0.25 m และความลึกของท่อระบายน้ำจากก้นสระเป็น 1 m ลงในสมการ (E8.3-1) ได้เป็น (E8.3-2)

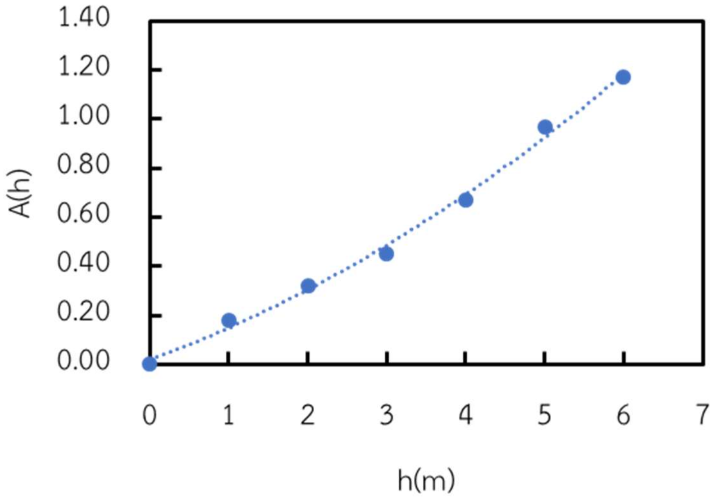
$$\frac{dt}{dh} = -\frac{4A(h)}{\pi(0.25)^2\sqrt{2x9.8x(h+1)}} = -4.604\frac{A(h)}{\sqrt{h+1}} \qquad \text{(E8.3-2)}$$

ดังนั้นสมการการประมาณค่าด้วยวิธีการประมาณค่าจากค่ากลางดังสมการ (E8.3-3)

$$t_{i+1} = t_i + f(h_{i+0.5}, t_{i+0.5})h = t_i - 4.604\frac{A(h_{i+0.5})}{\sqrt{h_{i+0.5}+1}}h \qquad \text{(E8.3-3)}$$

แต่จากสมการ (E8.3-3) จำเป็นต้องทราบค่าของ $A(h_{i+0.5})$ ดังนั้นใช้วิธีการประมาณค่าใช้ช่วงด้วยสมการพหุนามกำลังสองเพื่อหาที่ $A(h)$ ที่ระดับความลึกของน้ำจากก้นสระต่างๆ ดังสมการ (E8.3-4) และผลการคำนวณที่ได้ดังแสดงในตารางที่ E8.3-2

$$A(h) = 0.0129h^2 + 0.1171h + 0.0186 \qquad \text{(E8.3-4)}$$



รูปที่ E8.3-1 วิธีการประมาณค่าใช้ช่วงด้วยสมการพหุนามกำลังสองเพื่อหาที่ $A(h)$ ที่ระดับความลึกของน้ำจากก้นสระ

ตารางที่ E8.3-1 ข้อมูลพื้นที่หน้าตัดของน้ำในสระน้ำที่ระดับความสูงของน้ำจากก้นสระต่างๆ

h, m	5.5	4.5	3.5	2.5	1.5	0.5
A(h), m^2	1.0529	0.8068	0.5865	0.3920	0.2233	0.0804

เนื่องจากเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น ซึ่งทราบว่าที่เวลาเริ่มต้น (t = 0 min) ความสูงของระดับน้ำในสระเท่ากับ 0 m และโจทย์ต้องการทราบจะต้องใช้เวลานานเท่าไรจึงระบายน้ำในสระจนหมด ดังนั้นความสูงของระดับน้ำในสระจะมีค่าลดลง และจากตารางที่ E8.3-1 พบว่าข้อมูลพื้นที่หน้าตัดของน้ำในสระน้ำที่ระดับความลึกของน้ำต่างๆ ซึ่งมีระยะห่างของข้อมูลที่ระดับความสูงของน้ำจากก้นสระเท่ากับ 1 m ดังนั้น h จึงมีค่าเท่ากับ -1 m

รอบที่ 1 เมื่อ $h_0 = 6$ m และ $t_0 = 0$ sec เมื่อ $h = -1$ m

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า $t_{0.5}$

$$h_{0.5} = h_0 + 0.5h = 6 + 0.5(-1) = 5.5 \text{ m}$$

$$t_{0.5} = t_0 - 4.604\frac{A(h_0)}{\sqrt{h_0+1}}\left(\frac{h}{2}\right) = 0 - 4.604\frac{1.17}{\sqrt{6+1}}\left(\frac{-1}{2}\right) = 1.0180 \text{ sec}$$

ขั้นที่ 2 หาค่า t_1

$$t_1 = t_0 + f(h_{0.5}, t_{0.5})h = 0 + \left(-4.604\frac{A(h_{0.5})}{\sqrt{h_{0.5}+1}}\right)h = 0 + \left(-4.604\frac{1.0529}{\sqrt{5.5+1}}\right)(-1) = 1.9013\,\text{sec}$$

รอบที่ 2 เมื่อ $h_1 = 5\,\text{m}$ และ $t_1 = 1.9013\,\text{sec}$

ขั้นที่ 1 คำนวณหาค่า $t_{1.5}$

$$h_{1.5} = h_1 + 0.5h = 5 + 0.5(-1) = 4.5\,\text{m}$$

$$t_{1.5} = t_1 - 4.604\frac{A(h_1)}{\sqrt{h_1+1}}\left(\frac{h}{2}\right) = 1.9013 - 4.604\frac{0.97}{\sqrt{5+1}}\left(\frac{-1}{2}\right) = 2.8129\ \text{sec}$$

ขั้นที่ 2 หาค่า t_2

$$t_2 = t_1 + f(h_{1.5}, t_{1.5})h = 1.9014 + \left(-4.604\frac{A(h_{1.5})}{\sqrt{h_{1.5}+1}}\right)h = 1.9014 + \left(-4.604\frac{0.8068}{\sqrt{4.5+1}}\right)(-1) = 3.4852$$

ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าจากค่ากลางในรอบที่ 3 ถึง 6 สามารถสรุปผลการคำนวณได้ตามตารางที่ E8.3-2 จากตารางที่ 8.3-2 พบว่าเมื่อคำนวณถึงรอบที่ 6 ความสูงของปริมาตรน้ำในถังเท่ากับ 0 m พบว่าใช้เวลา 6.6753 sec

ตารางที่ E8.3-2 ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าจากค่ากลาง

i	h_i	t_i	$A(h_i)$	$h_{i+0.5}$	$A(h_{i+0.5})$	$t_{i+0.5}$	t_{i+1}
0	6	0.0000	1.1700	5.5	1.0529	1.0180	1.9014
1	5	1.9014	0.9700	4.5	0.8068	2.8130	3.4852
2	4	3.4852	0.6700	3.5	0.5865	4.1750	4.7581
3	3	4.7581	0.4500	2.5	0.392	5.2761	5.7228
4	2	5.7228	0.3200	1.5	0.2233	6.1481	6.3730
5	1	6.3730	0.1800	0.5	0.0804	6.6660	6.6753
6	0	6.6753	0.0000				

8.2.3 วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททา

วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททา (Runge-Kutta Method) เป็นวิธีประมาณค่าที่ปรับปรุงที่อาศัยอนุกรมเทย์เลอร์มาใช้เพื่อประมาณหาค่า y_{i+1} โดยมีรูปทั่วไปดังนี้

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$

เมื่อ

$$\phi = a_1k_1 + a_2k_2 + \ldots + a_nk_n$$

และ

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$
$$k_3 = f(x_i + p_2 h, y_i + q_{11} k_1 h + q_{22} k_2 h)$$
$$k_n = f(x_i + p_{n-1} h, y_i + q_{11} k_1 h + q_{22} k_2 h + \ldots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h)$$

เมื่อ p และ q เป็นค่าคงที่ที่มีความสัมพันธ์กับค่า k

8.2.3.1 วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสอง

วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสอง (Second-Order Runge-Kutta Methods) สามารถเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$
$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2) h$$

เมื่อ

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$

เมื่อ $a_2 = \frac{1}{2}$ และ $a_1 = \frac{1}{2}$ ค่า $p_1 = q_{11} = 1$ สมการที่ได้เป็นดังนี้ ซึ่งเป็นรูปแบบวิธีการประมาณค่าของฮวน

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$
$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2) h = y_i + (\frac{1}{2} k_1 + \frac{1}{2} k_2) h$$
$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + h, y_i + k_1 h)$$
$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}\left[f(x_i, y_i) + f(x_i + h, y_i + k_1 h)\right] h$$
$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{2}\left(f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)\right) h$$

เมื่อ $a_2 = 1$ และ $a_1 = 0$ ค่า $p_1 = q_{11} = \frac{1}{2}$ สมการที่ได้เป็นดังนี้ ซึ่งเป็นรูปแบบวิธีการประมาณค่าจากค่ากลาง

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$
$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2) h = y_i + k_2$$
$$k_1 = f(x_i, y_i)$$
$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2} k_1 h)$$
$$y_{i+1} = y_i + f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{1}{2} k_1 h) h$$

$$y_{i+1} = y_i + f(x_{i+1/2}, y_{i+1/2})h$$

เมื่อ $a_2 = \frac{2}{3}$ และ $a_1 = \frac{1}{3}$ ค่า $p_1 = q_{11} = \frac{3}{4}$ สมการที่ได้เป็นดังนี้ ซึ่งเป็นรูปแบบวิธีการประมาณค่าของรอล์สตัน (Ralston's Method)

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$

$$y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h = y_i + (\frac{1}{3}k_1 + \frac{2}{3}k_2)h$$

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}k_1h)$$

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{3}f(x_i, y_i) + \frac{2}{3}f(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}k_1h)\right]h$$

8.2.3.2 วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่

วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ (Fourth-Order Runge-Kutta Method) สามารถเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$

$$y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2 + a_3k_3 + a_4k_4)h$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$$

เมื่อ

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h) = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h)$$

$$k_3 = f(x_i + p_2h, y_i + q_{22}k_2h) = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h).$$

$$k_4 = f(x_i + p_3h, y_i + q_{33}k_3h) = f(x_i + h, y_i + k_3h)$$

ตัวอย่าง 8.4 เตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ประกอบด้วยก้อนยูเรเนียมออกไซด์ที่ถูกหุ้มด้วยโลหะอะลูมิเนียม จงหาอุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ที่ระยะรัศมี (r) เท่ากับ 0 2 4 6 8 และ 10 cm ด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ เมื่อสมการการถ่ายเทความร้อนเป็นดังสมการ (E8.4-1) สำหรับชั้นโลหะอะลูมิเนียม และ (E8.4-2) สำหรับก้อนยูเรเนียมออกไซด์

$$-k^C \frac{dT^C}{dr} = S_n\left(\frac{1}{3} + \frac{b}{5}\right)\frac{R_F^3}{r^2} \qquad \text{(E8.4-1)}$$

$$-k^F \frac{dT^F}{dr} = S_n\left(\frac{r}{3} + \frac{b}{R_F^2}\frac{r^3}{5}\right) \qquad \text{(E8.4-2)}$$

เมื่อ k^C และ k^F มีค่าเท่ากับ 6 และ 21.5 W/K-m, T^C และ T^F เป็นอุณหภูมิในชั้นยูเรเนียมออกไซด์และชั้นโลหะอะลูมิเนียม, R_F และ R_C เป็นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์และรัศมีของชั้นอะลูมิเนียมที่มีค่าเท่ากับ 6 และ 12 cm ตามลำดับ, ค่าคงที่ Sn และ b มีค่าเท่ากับ $4x10^6$ W/m^3 และ 5 ตามลำดับ และที่รอยต่อระหว่างชั้นชั้นยูเรเนียมออกไซด์และชั้นของชั้นอะลูมิเนียม อุณหภูมิที่ผิวรอยต่อระหว่างชั้นต้องมีอุณหภูมิเท่ากัน (รัศมีเท่ากับ 6 cm) หรือ $T^F = T^C$ และ $dT^F/dr = dT^C/dr$ และอุณหภูมิที่ผิวโลหะอะลูมิเนียม (r = 12 cm) เท่ากับ 500 K

วิธีทำ

เนื่องจากเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ทรงกลมที่ประกอบด้วยก้อนยูเรเนียมออกไซด์ที่ถูกหุ้มด้วยโลหะอะลูมิเนียมและมีสมการสมการการถ่ายเทความร้อน 2 สมการดังนั้นในการประมาณค่าของออยเลอร์ของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งจะแบ่งออกเป็น 2 ช่วง คือ ช่วงที่หนึ่งจากรัศมี 6 cm ถึง 12 cm ซึ่งเป็นของชั้นโลหะอะลูมิเนียม และช่วงที่หนึ่งจากรัศมี 0 cm ถึง 6 cm ซึ่งเป็นของชั้นยูเรเนียมออกไซด์

เนื่องจากเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น ซึ่งทราบว่าอุณหภูมิที่ผิวโลหะอะลูมิเนียม (r = 12 cm) เท่ากับ 500 K และโจทย์ต้องการทราบอุณหภูมิที่รัศมีเท่ากับ 0 2 4 6 8 และ 10 cm ดังนั้นระยะห่างของ h จึงมีค่าเท่ากับ -2 cm เนื่องจากการคำนวณจะเริ่มต้นจากรัศมีเป็น 12 cm แล้วคำนวณไปที่ 10 8 6 4 2 และ 0 cm

ช่วงที่ 1 จากรัศมี 12 cm ไป 6 cm ในชั้นโลหะอะลูมิเนียม

เมื่อแทนค่าของรัศมีของชั้นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์มีค่าเท่ากับ 6 cm ค่าคงที่ Sn มีค่าเท่ากับ $4x10^6$ W/m^3 b เท่ากับ 5 และ k^C มีค่าเท่ากับ 6 W/K-m ได้เป็นสมการ (E8.4-3)

$$-6\frac{dT^C}{dr} = 4x10^6\left(\frac{1}{3}+\frac{5}{5}\right)\frac{(0.06)^3}{r^2}$$

$$\frac{dT^C}{dr} = -\frac{4x10^6}{6}\left(\frac{4}{3}\right)\frac{(0.12)^3}{r^2} = -\frac{192}{r^2} \qquad \text{(E8.4-3)}$$

วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ (Fourth-Order Runge-Kutta Method) สามารถเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$T_{i+1}^C = T_i^C + \phi h$$

$$T_{i+1}^C = T_i^C + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h$$

เมื่อ

$$k_1 = f(r_i, T_i^C) = -\frac{1536}{r_i^2}$$

$$k_2 = f(r_i + \frac{1}{2}h, T_i^C + \frac{1}{2}k_1 h)$$

$$k_3 = f(r_i + \frac{1}{2}h, T_i^C + \frac{1}{2}k_2 h).$$

$$k_4 = f(r_i + h, T_i^C + k_3 h)$$

เนื่องจาก $f(r_i,T_i^C)=-\dfrac{192}{r_i^2}$ เป็นฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ แต่ขึ้นกับรัศมีเพียงอย่างเดียว ดังนั้นในการคำนวณไม่จำเป็นต้องหาค่าของ T_i^C

เมื่อ $h=-0.02$ m

คำนวณรอบที่ 1 เมื่อ $r_0=0.12$ m และ $T_0^C=500$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1=f(r_0,T_0^C)=-\frac{192}{r_0^2}=-\frac{192}{0.12^2}=-13,333.33$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_2=f(r_0+\frac{1}{2}h,T_0^C+\frac{1}{2}k_1h)=-\frac{192}{\left(r_0+\frac{1}{2}h\right)^2}=-\frac{192}{\left(0.12+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^2}=-\frac{192}{(0.11)^2}=-15,867.76$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3=f(r_0+\frac{1}{2}h,T_0^C+\frac{1}{2}k_2h)=-\frac{192}{\left(r_0+\frac{1}{2}h\right)^2}=-\frac{192}{\left(0.12+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^2}=-\frac{192}{(0.11)^2}=-15,867.76$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4=f(r_0+h,T_0^C+k_3h)=-\frac{192}{(r_0+h)^2}=-\frac{192}{(0.12-0.02)^2}=-\frac{192}{(0.10)^2}=-19,200.00$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_1^C

$$T_1^C=T_0^C+\frac{1}{6}\left(k_1+2k_2+2k_3+k_4\right)h$$

$$T_1^C=500+\frac{1}{6}\left(-13,333.33+2(-15,867.76)+2(-15,867.76)+(-19,200)\right)(-0.02)$$

$$T_1^C=820.01\text{ K}$$

คำนวณรอบที่ 2 เมื่อ $r_1=0.10$ m และ $T_1^C=820.01$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1=f(r_1,T_1^C)=-\frac{192}{r_1^2}=-\frac{192}{0.10^2}=-19,200$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_2=f(r_1+\frac{1}{2}h,T_1^C+\frac{1}{2}k_1h)=-\frac{192}{\left(r_1+\frac{1}{2}h\right)^2}=-\frac{192}{\left(0.10+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^2}=-\frac{192}{(0.10)^2}=-23,703.70$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3 = f(r_1 + \frac{1}{2}h, T_1^C + \frac{1}{2}k_1 h) = -\frac{192}{\left(r_1 + \frac{1}{2}h\right)^2} = -\frac{192}{\left(0.10 + \frac{1}{2}(-0.02)\right)^2} = -\frac{192}{(0.10)^2} = -23,703.70$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4 = f(r_1 + h, T_1^C + k_3 h) = -\frac{192}{(r_1 + h)^2} = -\frac{192}{(0.10 - 0.02)^2} = -\frac{192}{(0.08)^2} = -30,000.00$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_2^C

$$T_2^C = T_1^C + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)h$$

$$T_2^C = 820.01 + \frac{1}{6}(-19,200 + 2(-23,703.70) + 2(-23,703.70) + (-30,000))(-0.02)$$

$$T_2^C = 1,300.06\,\text{K}$$

คำนวณรอบที่ 3เมื่อ $r_2 = 0.08$ m และ $T_2^C = 1,300.06$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1 = f(r_2, T_2^C) = -\frac{192}{r_2^2} = -\frac{192}{0.08^2} = -30,000$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_3 = f(r_2 + \frac{1}{2}h, T_2^C + \frac{1}{2}k_1 h) = -\frac{192}{\left(r_2 + \frac{1}{2}h\right)^2} = -\frac{192}{\left(0.08 + \frac{1}{2}(-0.02)\right)^2} = -\frac{192}{(0.07)^2} = -39,183.67$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3 = f(r_2 + \frac{1}{2}h, T_2^C + \frac{1}{2}k_1 h) = -\frac{192}{\left(r_2 + \frac{1}{2}h\right)^2} = -\frac{192}{\left(0.08 + \frac{1}{2}(-0.02)\right)^2} = -\frac{192}{(0.07)^2} = -39,183.67$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4 = f(r_2 + h, T_2^C + k_3 h) = -\frac{192}{(r_2 + h)^2} = -\frac{192}{(0.08 - 0.02)^2} = -\frac{192}{(0.06)^2} = -53,333.33$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_2^C

$$T_3^C = T_2^C + \frac{1}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)h$$

$$T = 1,300.06 + \frac{1}{6}(-30,000 + 2(-39,183.67) + 2(-39,183.67) + (-53,333.33))(-0.02)$$

$$T_3^C = 2,100.29\,\text{K}$$

ช่วงที่ 2 จากรัศมี 6 cm ไป 0 cm ในชั้นโลหะยูเรเนียมออกไซด์

เมื่อแทนค่าของรัศมีของชั้นรัศมีของชั้นยูเรเนียมออกไซด์มีค่าเท่ากับ 6 cm ค่าคงที่ S_n มีค่าเท่ากับ $4\text{x}10^6$ W/m^3 b เท่ากับ 5 และ k^F มีค่าเท่ากับ 21.5 W/K-m ได้เป็นสมการ (E8.1-4)

$$-k^F \frac{dT^F}{dr} = S_n\left(\frac{r}{3}+\frac{b}{R_F^2}\frac{r^3}{5}\right)$$

$$-21.5\frac{dT^F}{dr} = 4x10^6\left(\frac{r}{3}+\frac{5}{(0.06)^2}\frac{r^3}{5}\right)$$

$$\frac{dT^F}{dr} = -\frac{4x10^6}{21.5}\left(\frac{r}{3}+\frac{5}{(0.06)^2}\frac{r^3}{5}\right) = -6.2015\times10^4 r - 5.1679\times10^7 r^3 \qquad \text{(E8.1-4)}$$

วิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ (Fourth-Order Runge-Kutta Method) สามารถเขียนในรูปสมการได้ดังนี้

$$T_{i+1}^F = T_i^F + \phi h = T_i^F + \frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)h$$

เมื่อ

$$k_1 = f(r_{in,i}, T_i^F) = -6.2015\times10^4 r_{in,i} - 5.1679\times10^7 r_{in,i}^3$$

$$k_2 = f(r_{in,i}+\frac{1}{2}h, T_i^F+\frac{1}{2}k_1h)$$

$$k_3 = f(r_{in,i}+\frac{1}{2}h, T_i^F+\frac{1}{2}k_2h).$$

$$k_4 = f(r_{in,i}+h, T_i^F+k_3h)$$

เนื่องจาก $f(r_{in,i}, T_i^F) = -6.2015\times10^4 r_{in,i} - 5.1679\times10^7 r_{in,i}^3$ เป็นฟังก์ชันที่ไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ แต่ขึ้นกับรัศมีเพียงอย่างเดียว ดังนั้นในการคำนวณไม่จำเป็นต้องหาค่าของ T_i^F

เมื่อ $h = -0.02$ m

คำนวณรอบที่ 1 เมื่อ $r_{in,0} = 0.06$ m และ $T_0^F = T_3^C = 2,100.29$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1 = f(r_{in,0}, T_0^F) = -6.2015\times10^4 r_{in,0} - 5.1679\times10^7 r_{in,0}^3$$

$$k_1 = -6.2015\times10^4\times0.06 - 5.1679\times10^7\times0.06^3 = -14,883.56$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_2 = -6.2015\times10^4\left(r_{in,0}+\frac{1}{2}h\right) - 5.1679\times10^7\left(r_{in,0}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_2 = -6.2015\times10^4\times\left(0.06+\frac{1}{2}(-0.02)\right) - 5.1679\times10^7\times\left(0.06+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -9,560.62$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3 = f(r_{in,0}+\frac{1}{2}h, T_0^F+\frac{1}{2}k_2h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,0}+\frac{1}{2}h\right) - 5.1679\times10^7\left(r_{in,0}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_3 = -6.2015\times10^4 \times\left(0.06+\frac{1}{2}(-0.02)\right)-5.1679\times10^7 \times\left(0.06+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -9,560.62$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4 = f(r_{in,0}+h, T_0^F + k_3 h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,0}+h\right)-5.1679\times10^7\left(r_{in,0}+h\right)^3$$

$$k_4 = -6.2015\times10^4\left(0.06+(-0.02)\right)-5.1679\times10^7\left(0.06+(-0.02)\right)^3 = -5,788.06$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_1^F

$$T_1^F = T_0^F + \frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)h$$

$$T_3^C = 1,300.06+\frac{1}{6}(-30,000+2\left(-39,183.67\right)+2\left(-39,183.67\right)+\left(-53,333.33\right))(-0.02)$$

$T_1^F = 2,296.67$ K

คำนวณรอบที่ 2 เมื่อ $r_{in,1} = 0.04$ m และ $T_1^F = 2,296.67$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1 = f(r_{in,1}, T_1^F) = -6.2015\times10^4 r_{in,1} - 5.1679\times10^7 r_{in,1}^3$$

$$k_1 = -6.2015\times10^4\times0.04-5.1679\times10^7\times0.04^3 = -5,788.06$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_2 = -6.2015\times10^4\left(r_{in,1}+\frac{1}{2}h\right)-5.1679\times10^7\left(r_{in,1}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_2 = -6.2015\times10^4\times\left(0.04+\frac{1}{2}(-0.02)\right)-5.1679\times10^7\times\left(0.04+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -3,255.78$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3 = f(r_{in,1}+\frac{1}{2}h, T_1^F+\frac{1}{2}k_2 h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,1}+\frac{1}{2}h\right)-5.1679\times10^7\left(r_{in,1}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_3 = -6.2015\times10^4\left(0.04+\frac{1}{2}(-0.02)\right)-5.1679\times10^7\left(0.04+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -3,255.78$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4 = f(r_{in,1}+h, T_1^F + k_3 h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,1}+h\right)-5.1679\times10^7\left(r_{in,1}+h\right)^3$$

$$k_4 = -6.2015\times10^4\left(0.04+(-0.02)\right)-5.1679\times10^7\left(0.04+(-0.02)\right)^3 = -1,653.73$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_2^F

$$T_2^F = T_1^F + \frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)h$$

$$T_2^F = 2,296.67+\frac{1}{6}\left(-5,788.06+2(-3,255.78)+2(-3,255.78)+(-1,653.73)\right)(-0.02)$$

$T_2^F = 2,364.89$ K

คำนวณรอบที่ 3 เมื่อ $r_{in,2} = 0.02$ m และ $T_2^F = 2,364.89$ K

ขั้นที่ 1 คำนวณหา k_1

$$k_1 = f(r_{in,2}, T_2^F) = -6.2015\times10^4 r_{in,2} - 5.1679\times10^7 r_{in,2}^3$$

$$k_1 = -6.2015\times10^4 \times 0.02 - 5.1679\times10^7 \times 0.02^3 = -1,653.73$$

ขั้นที่ 2 คำนวณหา k_2

$$k_2 = -6.2015\times10^4\left(r_{in,2}+\frac{1}{2}h\right) - 5.1679\times10^7\left(r_{in,2}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_2 = -6.2015\times10^4\times\left(0.02+\frac{1}{2}(-0.02)\right) - 5.1679\times10^7\times\left(0.02+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -671.83$$

ขั้นที่ 3 คำนวณหา k_3

$$k_3 = f(r_{in,2}+\frac{1}{2}h, T_2^F+\frac{1}{2}k_2h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,2}+\frac{1}{2}h\right) - 5.1679\times10^7\left(r_{in,2}+\frac{1}{2}h\right)^3$$

$$k_3 = -6.2015\times10^4\times\left(0.02+\frac{1}{2}(-0.02)\right) - 5.1679\times10^7\times\left(0.02+\frac{1}{2}(-0.02)\right)^3 = -671.83$$

ขั้นที่ 4 คำนวณหา k_4

$$k_4 = f(r_{in,2}+h, T_2^F+k_3h) = -6.2015\times10^4\left(r_{in,2}+h\right) - 5.1679\times10^7\left(r_{in,2}+h\right)^3$$

$$k_4 = -6.2015\times10^4\left(0.02+(-0.02)\right) - 5.1679\times10^7\left(0.02+(-0.02)\right)^3 = 0$$

ขั้นที่ 5 คำนวณหา T_3^F

$$T_3^F = T_2^F + \frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)h = 2,364.89+\frac{1}{6}\left(-1,653.73+2\left(-671.83\right)+2\left(-671.83\right)+\left(0\right)\right)(-0.02)$$

$$T_3^F = 2,379.36\text{ K}$$

จากการคำนวณพบว่าอุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ที่ประกอบด้วยแท่งยูเรเนียมออกไซด์และชั้นโลหะอะลูมิเนียมที่ห้อหุ้มที่ระยะรัศมีเป็น 0 2 4 6 8 และ 10 cm พบว่าอุณหภูมิภายในเตาปฏิกรณ์นิวเคลียร์ที่ระยะรัศมี 0 cm มีอุณหภูมิ 2,379.36 K ระยะรัศมี 2 cm มีอุณหภูมิ 2,364.89 K ระยะรัศมี 4 cm มีอุณหภูมิ 2,296.67 K ระยะรัศมี 6 cm มีอุณหภูมิ 2,100.29 K ระยะรัศมี 8 cm มีอุณหภูมิ 1,300.06 K และระยะรัศมี 10 cm มีอุณหภูมิ 820.01 K ในตารางที่ E8.4-1 แสดงผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่

ตารางที่ E8.4-1 ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่

สำหรับชั้นโลหะอะลูมิเนียม

i	r_i	T_i^C	k_1	k_2	k_3	k_4	r_{i+1}	T_{i+1}^C
0	0.12	500	-13333.33	-15867.77	-15867.77	-19200.00	0.10	820.01
1	0.1	820.01	-19200.00	-23703.70	-23703.70	-30000.00	0.08	1300.06
2	0.08	1300.06	-30000.00	-39183.67	-39183.67	-53333.33	0.06	2100.29

ชั้นโลหะยูเรเนียมออกไซด์

i	$r_{in,i}$	T_i^F	k_1	k_2	k_3	k_4	$r_{in,i+1}$	T_{i+1}^F
0	0.06	2100.29	-14883.56	-9560.62	-9560.62	-5788.06	0.04	2296.67
1	0.04	2296.67	-5788.06	-3255.78	-3255.78	-1653.73	0.02	2364.89
2	0.02	2364.89	-1653.73	-671.83	-671.83	0.00	0.00	2379.36

ในรูปที่ E8.4-1 แสดงการเปรียบเทียบผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ และด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์จากตัวอย่างที่ 8.1 ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับค่าจริงที่ได้จากการอินทิเกรตดังสมการ (E8.4-3) และสมการ (E8.4-4)

$$\frac{dT^C}{dr} = -\frac{4x10^6}{6}\left(\frac{4}{3}\right)\frac{(0.12)^3}{r^2} = -\frac{192}{r^2} \qquad \text{(E8.4-3)}$$

$$\int dT^C = \int -\frac{192}{r^2}dr$$

$$T^C = \frac{192}{r} + C$$

เนื่องจากที่ $r = 0.12$ m และ $T^C = 500$ Kเมื่อแทนค่าเพื่อหาค่า C จะได้เป็นสมการ (E8.4-5)

$$500 = \frac{192}{0.12} + C \text{ ดังนั้น } C = -1100$$

$$T^C = \frac{192}{r} - 1100 \text{ K}$$

$$\frac{dT^F}{dr} = -6.2015\times10^4 r - 5.1679\times10^7 r^3 \qquad \text{(E8.1-4)}$$

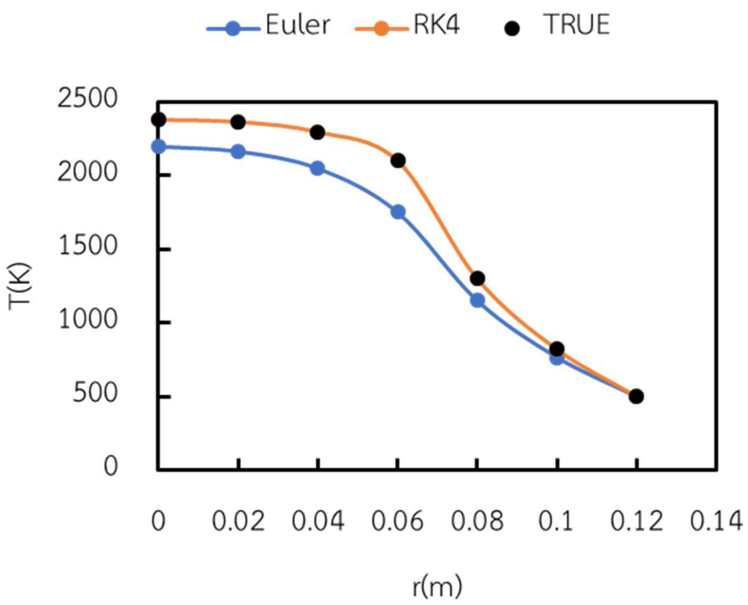
$$\int dT^F = \int\left(-6.2015\times10^4 r - 5.1679\times10^7 r^3\right)dr$$

$$T^F = -3.1008\times10^4 r^2 - 1.2954\times10^7 r^4 + C$$

เนื่องจากที่ $r = 0.06$ m และ $T^F = T^C$ K ซึ่งจากสมการ (E8.4-5) พบว่า $T^C = 2100$ K เมื่อแทนค่าเพื่อหาค่า C จะได้เป็นสมการ (E8.4-6)

$$2100 = -3.1008\times10^4(0.06)^2 - 1.2954\times10^7(0.06)^4 + C \text{ ดังนั้น } C = 2379.5126$$

$$T^F = -3.1008\times10^4 r^2 - 1.2954\times10^7 r^4 + 2379.5126 \qquad \text{(E8.1-6)}$$



รูปที่ E8.4-1 การเปรียบเทียบผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่ วิธีการประมาณค่าของออยเลอร์กับค่าจริง

จากรูปที่ E8.4-1 พบว่าผลการคำนวณหาอุณหภูมิที่รัศมีต่างๆ ด้วยวิธีการประมาณค่าของรุงเงอ-คุททาอันดับสี่มีความคลาดเคลื่อนจากค่าจริงเล็กน้อย ในขณะที่เมื่อคำนวณหาอุณหภูมิที่รัศมีต่างๆ ด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์กมีความคลาดเคลื่อนจากค่าจริงมาก

8.3 การหาผลเฉลยของปัญหาในระบบสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ

ในปัญญาทางวิศวกรรมบางครั้งอยู่ในรูปของระบบสมการอนุพันธ์ (Systems of Equations)

$$\frac{dy_1}{dx} = f_1\left(x, y_1, y_2, \ldots, y_n\right)$$
$$\frac{dy_2}{dx} = f_2\left(x, y_1, y_2, \ldots, y_n\right)$$
$$\frac{dy_n}{dx} = f_n\left(x, y_1, y_2, \ldots, y_n\right)$$

ดังนั้นการแก้ปัญหาของระบบสมการเชิงอนุพันธ์ซี่สามารถแก้ปัญหาด้วยวิธีต่างๆ ที่ได้กล่าวมา ในหัวข้อ 8.2

ตัวอย่างที่ 8.5 ในปฏิกิริยาเคมีในเครื่องปฏิกรณ์แบบถังกวนสำหรับปฏิกิริยา A $\longrightarrow$ B พบว่าอัตราการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของ A และ B ดังนี้ $\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau}\left(C_{A0} - C_A\right) - kC_A$ และ $\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau}C_B + kC_A$ เมื่อ C_{A0} คือความเข้มข้นของสาร A ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (mol/L) C_A คือความเข้มข้นของสาร A ในเครื่องปฏิกรณ์

(mol/L) C_B คือความเข้มข้นของสาร B ในเครื่องปฏิกรณ์ (mol/L) τ คือเวลาสารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์ (min) และ k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (min^{-1}) จงหาความเข้มข้นของสาร A และ B ที่เวลา 10 min เมื่อความเข้มข้นของสาร A ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์เป็น 20 mol/L เวลาสารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็น 5 min และค่าคงที่ปฏิกิริยาเป็น 0.12 min^{-1}

วิธีทำ

เมื่อแทนความเข้มข้นของสาร A ขาเข้าเครื่องปฏิกรณ์เป็น 20 mol/L เวลาสารไหลอยู่ภายในเครื่องปฏิกรณ์เป็น 5 min และ ค่าคงที่ปฏิกิริยาเป็น 0.12 min^{-1}ได้เป็นสมการ (E8.5-1) และ (E8.5-2)

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{\tau}\left(C_{A0} - C_A\right) - kC_A = \frac{1}{5}\left(20 - C_A\right) - 0.12C_A = 4 - 0.32C_A \quad \text{(E8.5-1)}$$

$$\frac{dC_B}{dt} = \frac{1}{\tau}C_B + kC_A = \frac{1}{5}C_B + 0.12C_A = 0.2C_B + 0.12C_A \quad \text{E8.5-2)}$$

เปลี่ยนให้อยู่ในรูปการการประมาณค่าของออยเลอร์ดังสมการ (E8.5-3) และ (E8.5-4) สำหรับสาร A และสาร B

$$C_{A,i+1} = C_{A,i} + f(t_i, C_{A,i}, C_{B,i})h = C_{A,i} + \left(4 - 0.32C_{A,i}\right)h \quad \text{(E8.5-3)}$$

$$C_{B,i+1} = C_{B,i} + f(t_i, C_{A,i}, C_{B,i})h = C_{B,i} + \left(0.2C_{B,i} + 0.12C_{A,i}\right)h \quad \text{(E8.5-4)}$$

เมื่อ $h = 1$ min

รอบที่ 1 เมื่อ $t_0 = 0$ min $C_{A,0} = 20$ mol/L และ $C_{B,0} = 0$ mol/L

$t_1 = t_0 + h = 0 + 1 = 1$ min

$C_{A,1} = C_{A,0} + \left(4 - 0.32C_{A,0}\right)h = 20 + (4 - 0.32 \times 20)(1) = 17.60$ mol/L

$C_{B,1} = C_{B,0} + \left(0.2C_{B,0} + 0.12C_{A,0}\right)(1) = 0 + \left(0.2 \times 0 + 0.12 \times 20\right)(1) = 2.4$ mol/L

รอบที่ 2 เมื่อ $C_{A,1} = 17.6$ mol/L $C_{B,1} = 2.4$ mol/L

$t_2 = t_1 + h = 1 + 1 = 2$ min

$C_{A,2} = C_{A,1} + \left(4 - 0.32C_{A,1}\right)h = 20 + (4 - 0.32 \times 17.6)(1) = 15.968$ mol/L

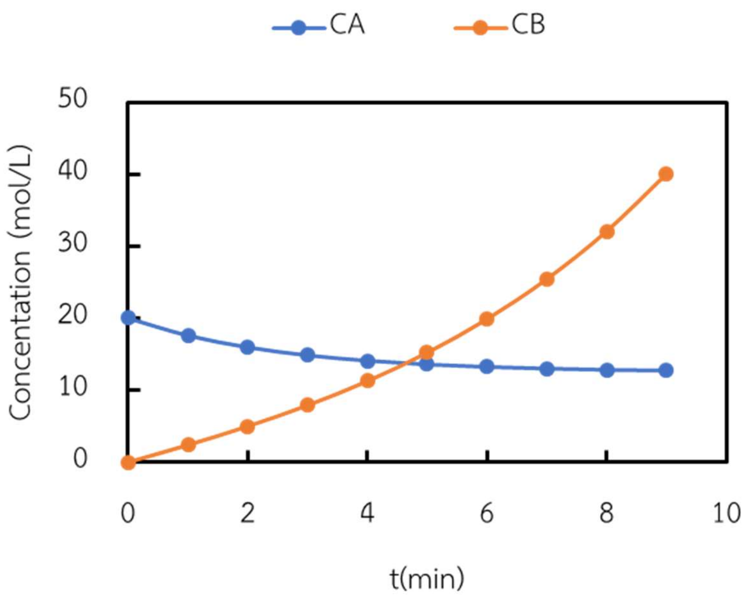
$C_{B,2} = C_{B,1} + \left(0.2C_{B,1} + 0.12C_{A,1}\right)(1) = 1.6 + \left(0.2 \times 1.6 + 0.12 \times 17.6\right)(1) = 2.11$ mol/L

ผลการคำนวณความเข้มข้นของสาร A และ B ที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ที่เวลาต่างๆ ด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์ในรอบอื่น แสดงในตารางที่ E8.5-1 จากตารางที่ 8.5-1 พบว่าความเข้มข้นของสาร A และ B ที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์เมื่อเวลาผ่านไป 10 min มีค่าเท่ากับ 12.6585 และ 49.6179 mol/L ตามลำดับ ดังแสดงดังรูปที่ E8.5-1

ตารางที่ E8.5-1 ผลการคำนวณความเข้มข้นของสาร A และ B ที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์ที่เวลาต่างๆ ด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์

i	t_i	$C_{A,i}$	$C_{B,i}$ Cbi	$\frac{dC_{A,i}}{dt}$	$\frac{dC_{\mathrm{B},i}}{dt}$	t_{i+1}	$C_{A,i+1}$	$C_{B,i+1}$

0	0	20.0000	0.0000	-2.4000	2.4000	1	17.6000	2.4000
1	1	17.6000	2.4000	-1.6320	2.5920	2	15.9680	4.9920
2	2	15.9680	4.9920	-1.1098	2.9146	3	14.8582	7.9066
3	3	14.8582	7.9066	-0.7546	3.3643	4	14.1036	11.2709
4	4	14.1036	11.2709	-0.5132	3.9466	5	13.5905	15.2175
5	5	13.5905	15.2175	-0.3489	4.6743	6	13.2415	19.8918
6	6	13.2415	19.8918	-0.2373	5.5673	7	13.0042	25.4592
7	7	13.0042	25.4592	-0.1614	6.6523	8	12.8429	32.1115
8	8	12.8429	32.1115	-0.1097	7.9634	9	12.7332	40.0749
9	9	12.7332	40.0749	-0.0746	9.5430	10	12.6585	49.6179



รูปที่ E8.5-1 ความเข้มข้นของสาร A และ B ที่ขาออกเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลที่เวลาต่างๆ

ตัวอย่าง 8.6 ปฏิกิริยาของ A $\longrightarrow$ B เกิดในเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลที่สภาวะคงตัว เมื่ออัตราการหายไปของสาร A เป็นอันดับหนึ่งของความเข้มข้นของสาร A ซึ่งสามารถเขียนสมการอธิบายความเข้มข้นของ A (mol/L) ดังสมการ (E8.6-1)

$$D\frac{d^2C_A}{dx^2} - U\frac{dC_A}{dx} - kC_A = 0 \qquad \text{(E8.6-1)}$$

เมื่อ D คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ (5000 m^2/hr) U คือความเร็วของของไหล (100 m/hr) k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (2 hr^{-1}) x คือความยาวของเครื่องปฏิกรณ์ (100 m) และความเข้มข้นของสาร A ที่ทางเข้า (C_{in})

เท่ากับ 100 mol/L จงหาความเข้มของของสาร A ที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล ด้วยวิธีการของ euler เมื่อสภาวะที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (x = 0 m) ดังสมการ (E8.6-2)

$$D\left.\frac{dC_A}{dx}\right|_{x=0} = UC_{A,0} - UC_{A,in} \tag{E8.6-2}$$

และที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์ $x = 100$ m ดังสมการ (E8.6-3)

$$\left.\frac{dC_A}{dx}\right|_{x=100} = 0 \tag{E8.6-3}$$

วิธีทำ

เนื่องจากเป็นปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสอง ดังนั้นต้องเปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองให้เป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

โดยกำหนดให้ $W = \frac{dC_A}{dx}$ ดังนั้น $\frac{dW}{dx} = \frac{d^2C_A}{dx^2}$ ทำให้สมการความเข้มข้นของสาร A จากสมการ (E8.6-1)ได้เป็นสมการ (E8.6-3)

$$D\frac{dW}{dx} - UW - kC_A = 0 \tag{E8.6-3}$$

และ

$$\frac{dC_A}{dx} = W \tag{E8.6-4}$$

ซึ่งเป็นระบบสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งทั้ง 2 สมการ แล้วจัดรูปสมการ (E8.6-3) และ (E8.6-4) ให้อยู่ในรูปการประมาณค่าของออยเลอร์ดังสมการ E8.6-5) (และ (E8.6-6) ตามลำดับ

$$\frac{dW}{dx} = \frac{U}{D}W + \frac{k}{D}C_A$$

$$W_{i+1} = W_i + \left(\frac{U}{D}W_i + \frac{k}{D}C_{A,i}\right)h \tag{E8.6-5}$$

$$\frac{dC_A}{dx} = W$$

$$C_{A,i+1} = C_{A,i} + W_i h \tag{E8.6-6}$$

เมื่อแทนค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เท่ากับ 5000 m^2/hr ความเร็วของของไหลเท่ากับ 100 m/hr และค่าคงที่ปฏิกิริยาเท่ากับ 2 hr^{-1} ได้เป็นสมการ (E8.5-7)

$$W_{i+1} = W_i + \left(\frac{100}{5000}W_i + \frac{2}{5000}C_{A,i}\right)h = W_i + (0.02W_i + 4\times10^{-4}C_{A,i})h \tag{E8.6-7}$$

กำหนดให้ $h = 10$ m

รอบที่ 1 เมื่อ $x_0 = 0$ m

$x_1 = x_0 + h = 0 + 10 = 10$ m

เนื่องจากสภาวะที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (x = 0 m) ดังสมการ (E8.6-2) ดังนั้น W_0 ดังสมการ (E8.6-8) เมื่อสมมุติให้ $C_{A,0} = 100$ mol/L

$$W_0 = \left.\frac{dC_A}{dx}\right|_{x=0} = \frac{UC_{A,0} - UC_{A,in}}{D} = \frac{100\times100 - 100\times100}{5000} = 0.0 \qquad \text{(E8.6-8)}$$

$W_1 = W_0 + (0.02W_0 + 4\times10^{-4}C_{A,0})h = 0 + (0.02(0) + 4\times10^{-4}\times100)\times10 = 0.4$

$C_{A,1} = C_{A,0} + W_0 h = 100 + 0\times10 = 100$ mol/L

รอบที่ 2 เมื่อ $x_1 = 10$ m $C_{A,1} = 100$ mol/L และ $W_1 = 0.4$

$x_2 = x_1 + h = 10 + 10 = 20$ m

$W_2 = W_1 + (0.02W_1 + 4\times10^{-4}C_{A,1})h = 0.4 + (0.02(0.4) + 4\times10^{-4}\times100)\times10 = 0.88$

$C_{A,2} = C_{A,1} + W_1 h = 100 + 0.4\times10 = 104$ mol/L

รอบที่ 3 เมื่อ $x_2 = 20$ m $C_{A,2} = 104$ mol/L และ $W_2 = 0.88$

$x_3 = x_2 + h = 20 + 10 = 30$ m

$W_3 = W_2 + (0.02W_2 + 4\times10^{-4}C_{A,2})h = 0.88 + (0.02\times0.88 + 4\times10^{-4}\times104)\times10 = 1.4720$

$C_{A,3} = C_{A,2} + W_2 h = 104 + 1.4720\times10 = 112.8000$ mol/L

ผลการคำนวณด้วยวิธีการประมาณค่าของออยเลอร์ในรอบที่ 3 ถึง 10 สามารถสรุปผลการคำนวณได้ตามตารางที่ E8.6-1 เนื่องจากที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์ $\left.\frac{dC_A}{dx}\right|_{x=100} = 0$ ซึ่งจากตารางที่ 8.6-1 พบว่า $W_{10} = 14.5226$ แสดงว่าค่า $C_{A,0}$ ที่สมมุติให้เท่ากับ 100 mol/L ไม่เหมาะสม ดังนั้นสมมุติให้ $C_{A,0} = 62.3330$ mol/L พบว่าผลการคำนวณจากตารางที่ E8.6-1 พบว่า $W_{10} = 0$ แสดงว่าค่า $C_{A,0}$ ที่สมมุติให้เท่ากับ 62.3330 mol/L มีความเหมาะสม สำหรับความเข้มข้นของสาร A ที่ระยะทางต่างๆ แสดงดังรูปที่ 8.6-1

ตารางที่ 8.6-1 ตารางประกอบการคำนวณตัวอย่าง 8.6

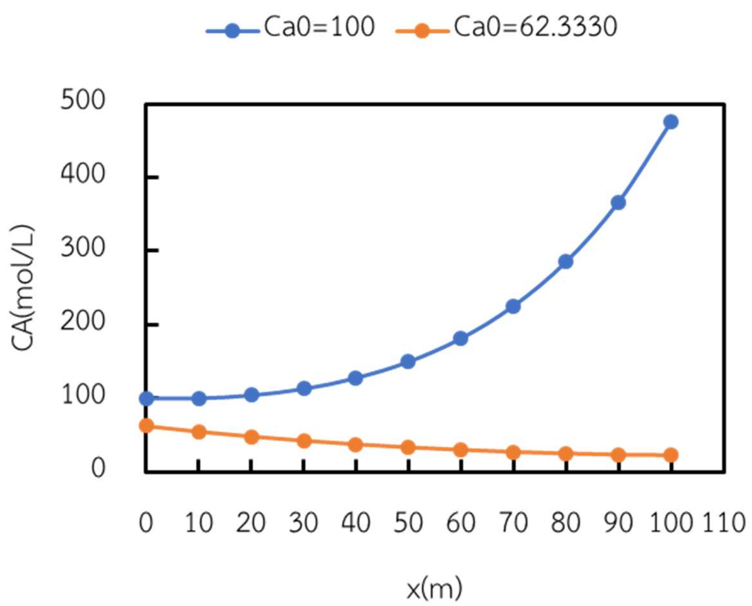
สมมุติให้ $C_{A,0} = 100$ mol/L

i	x_i	$C_{A,i}$	W_i	x_{i+1}	$C_{A,i+1}$	W_{i+1}
0	0	100.0000	0.0000	10.0000	0.4000	100.0000
1	10.0000	100.0000	0.4000	20.0000	0.8800	104.0000
2	20.0000	104.0000	0.8800	30.0000	1.4720	112.8000
3	30.0000	112.8000	1.4720	40.0000	2.2176	127.5200
4	40.0000	127.5200	2.2176	50.0000	3.1712	149.6960
5	50.0000	149.6960	3.1712	60.0000	4.4042	181.4080

6	60.0000	181.4080	4.4042	70.0000	6.0107	225.4502
7	70.0000	225.4502	6.0107	80.0000	8.1146	285.5572
8	80.0000	285.5572	8.1146	90.0000	10.8798	366.7037
9	90.0000	366.7037	10.8798	100.0000	14.5226	475.5017
10	100.0000	475.5017	14.5226			

สมมุติให้ $C_{A,0} = 62.3330$ mol/L

i	x_i	$C_{A,i}$	W_i	x_{i+1}	$C_{A,i+1}$	W_{i+1}
0	0	62.3330	-0.7533	10.0000	-0.6547	54.7996
1	10.0000	54.7996	-0.6547	20.0000	-0.5664	48.2528
2	20.0000	48.2528	-0.5664	30.0000	-0.4867	42.5887
3	30.0000	42.5887	-0.4867	40.0000	-0.4137	37.7219
4	40.0000	37.7219	-0.4137	50.0000	-0.3455	33.5852
5	50.0000	33.5852	-0.3455	60.0000	-0.2803	30.1301
6	60.0000	30.1301	-0.2803	70.0000	-0.2158	27.3274
7	70.0000	27.3274	-0.2158	80.0000	-0.1497	25.1693
8	80.0000	25.1693	-0.1497	90.0000	-0.0789	23.6727
9	90.0000	23.6727	-0.0789	100.0000	0.0000	22.8836
10	100.0000	22.8836	0.0000			



รูปที่ E8.6-1 ความเข้มข้นของสาร A ที่ระยะทางต่างๆ ของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล เมื่อสมมุติให้ $C_{A,0}$ เท่ากับ 100 และ 62.3330 mol/L ตามลำดับ

8.4 การแก้สมการเชิงอนุพันธ์สามัญสำหรับปัญหาค่าขอบด้วยวิธียิงเป้า

ปัญหาค่าขอบ (Boundary-Value Problems) เป็นปัญหาที่ทราบข้อมูลที่จุดเริ่มต้นและจุดสุดท้ายของปัญหา เช่น การหาความเข้มข้นของสารที่เกิดปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหล ที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ (x เท่ากับ 0 m) พบว่าความเข้มข้นของสาร A เท่ากับ C_{A0} mol/L และที่ทางออกเครื่องปฏิกรณ์ (x ใดๆ) พบว่าความเข้มข้นของสาร A เท่ากับ C_A mol/L หรือ การหาความเข้มข้นของสารที่เกิดปฏิกิริยาในเครื่องปฏิกรณ์แบบกะ ที่เวลาเริ่มต้น (t เท่ากับ 0 min) พบว่าความเข้มข้นของสาร A เท่ากับ C_{A0} mol/L และเมื่อเวลาผ่านไป t min พบว่าความเข้มข้นของสาร A เท่ากับ C_A mol/L เป็นต้น หรืออุณหภูมิของลวดที่วางระหว่างผนังร้อน 2 ผนัง เป็นต้น ดังนั้นในส่วนนี้จึงเสนอวิธีการแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์สำหรับปัญหาค่าขอบเพื่อหาคำตอบของปัญหาค่า สำหรับวิธีการแก้ปัญหาสำหรับปัญหาค่าขอบสามารถใช้วิธีการแก้ปัญหาด้วยวิธียิงเป้า (The Shooting Method)

วิธียิงเป้าอาศัยการแก้ปัญหาแบบปัญหาที่ค่าเริ่มต้นเป็นการอาศัยการลองผิดลองถูกเพื่อสุ่มค่าเริ่มต้นแล้วปรับแก้ค่าเริ่มต้นที่ได้จากการลองผิดลองถูกโดยใช้สมการเส้นตรง ตัวอย่างปัญหาการนำความร้อนภายในขดลวด ซึ่งมีสมการถ่ายเทความร้อนดังนี้ $\dfrac{d^2T}{dx^2}+h'(T_\infty - T)=0$ ซึ่งจะเห็นว่าเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสอง และพบว่าอุณหภูมิที่ผนังที่ $x=0$ m มีค่าเท่ากับ $T=T_a$ °C และอุณหภูมิที่ผนังที่ $x=L$ m มีค่าเท่ากับ $T=T_b$ °C สำหรับวิธีการแก้ปัญหาค่าขอบสามารถทำได้โดยอาศัยการประยุกต์ปัญหาที่มีค่าเริ่มต้นดังนี้

ขั้นที่ 1. กำหนดให้ $z=\dfrac{dT}{dx}$ และ $\dfrac{d^2T}{dx^2}=\dfrac{dz}{dx}$ ดังนั้น $\dfrac{dz}{dx}+h'(T_\infty - T)=0$

ขั้นที่ 2. ลองสุ่มค่าของ z มา 2 ค่า โดยถ้า $z=z_1$ ซึ่งเมื่อประมาณค่าจนกระทั่งได้ค่าอุณหภูมิที่ $x=L$ m จะได้อุณภูมิเท่ากับ T_{b1} °C และถ้า $z=z_2$ ซึ่งเมื่อประมาณค่าจนกระทั่งได้ค่าอุณหภูมิที่ $x=L$ mจะได้อุณหภูมิเท่ากับ T_{b2} °C

ขั้นที่ 3 ใช้สมการเส้นตรงในการประมาณค่าของ z ใหม่จากสมการ

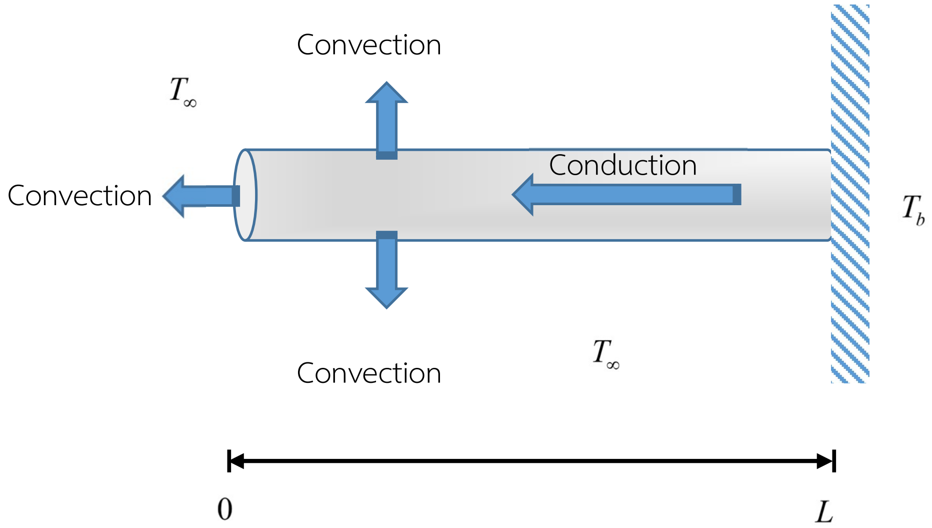
$$\frac{\Delta z}{\Delta T_b}=\frac{z_2-z_1}{T_{b2}-T_{b1}}$$

ดังนั้นค่า z ที่จะทำให้ $x=L$ m จะได้อุณภูมิปลายเท่ากับ T_b °C

$$z=z_1+\frac{z_2-z_1}{T_{b2}-T_{b1}}\left(T_b-T_{b1}\right)$$

ตัวอย่าง 8.7 จงหาการกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันดังนี้ ที่ $x=0$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(0)=300$ °C และที่ $x=10$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(10)=400$ °C เมื่อมี

สมการถ่ายเทความร้อนคือ $\frac{d^2T}{dx^2}+h'(T_\infty - T)=0$ ค่าคงที่ (h') เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C โดยให้ระยะห่างของ x เท่ากับ 2 m



รูปที่ E8.7-1 การนำความร้อนและการพาความร้อนของแท่งลวด
ที่มา: Chapra (2010)

วิธีทำ

กำหนดให้ $z=\frac{dT_x}{dx}$ ดังนั้น $\frac{dz}{dx}+h'(T_\infty - T)=0$ หรือ $\frac{dz}{dx}+0.05(200-T)=0$

ซึ่งจะได้ระบบ 2 สมการ และประยุกต์ใช้วิธีการประมาณแบบออยเลอร์ ดังสมการ (E8.7-1) และ (E8.7-2)

$\frac{dT_x}{dx}=z$ ดังนั้น

$$T_{i+1}=T_i+f_1(z_i)h=T_i+z_ih \tag{E8.7-1}$$

$\frac{dz}{dx}=-0.05(200-T)$ ดังนั้น

$$z_{i+1}=z_i+f_2(x_i,z_i,T_i)h=z_i-0.05(200-T_i)h \tag{E8.7-2}$$

$\frac{dz}{dx}=-0.05(200-T)$ ดังนั้น $z_{i+1}=z_i+f_2(x_i,z_i,T_i)h=z_i-0.05(200-T_i)h$

ตัวอย่างการคำนวณครั้งที่ 1 ลองให้ $z_0=-5$

รอบ 1 $x=0$ m $T(0)=300$ °C และ $z_0=-5$

$x_1=x_0+h=0+2=2$ m

$T_1=T_0+z_0h=300+(-5)2=290$ °C

$z_1=z_0-0.05(200-T_0)h=-5-0.05(200-300)2=5$

รอบที่ 2 จาก $x_1 = 2$ m $T_1 = 290$ °C และ $z_1 = 5$

$x_2 = x_1 + h = 2 + 2 = 4$

$T_2 = T_1 + z_1 h = 290 + (5)2 = 300$ °C

$z_2 = z_1 - 0.05(200 - T_1)h = 5 - 0.05(200 - 290)2 = 14$

แทนค่าไปเรื่อยจน $x_5 = 10$ m ซึ่งจะได้ค่า $T_5 = 449.6$ °C ซึ่งพบว่า T_5 ที่ได้มีค่ามากกว่า $T(10) = 400$ °C แสดงว่าค่า $z_{0,1} = -5$ มีค่ามากเกินไป ดังนั้น $z_{0,2} = -10$

ตัวอย่างการคำนวณครั้งที่ 2 ลองให้ $z_0 = -10$

รอบ 1 $x = 0$ m $T(0) = 300$ °C และ $z_0 = -10$

$x_1 = x_0 + h = 0 + 2 = 2$ m

$T_1 = T_0 + z_0 h = 300 + (-10)2 = 280$ °C

$z_1 = z_0 - 0.05(200 - T_0)h = -5 - 0.05(200 - 280)2 = 0$

รอบที่ 2 จาก $x_1 = 2$ m $T_1 = 280$ °C และ $z_1 = 0$

$x_2 = x_1 + h = 2 + 2 = 4$ m

$T_2 = T_1 + z_1 h = 280 + (0)2 = 280$ °C

$z_2 = z_1 - 0.05(200 - T_1)h = 0 - 0.05(200 - 280)2 = 8$

แทนค่าไปเรื่อยจน $x_5 = 10$ m ซึ่งจะได้ค่า $T_5 = 379.2$ °C ซึ่งพบว่า T_5 ที่ได้มีค่าน้อยกว่า $T(10) = 400$ °C แสดงว่าค่า $z_{0,2} = -10$ มีค่าน้อยไป

ดังนั้นประมาณค่าของ z_0 ใหม่จากสมการดังต่อไปนี้

$$z_0 = z_{0,1} + \frac{z_{0,2} - z_{0,1}}{T_{b2} - T_{b1}}\left(T_b - T_{b1}\right)$$

$$z_0 = -5 + \frac{-10 - (-5)}{379.2 - 449.6}\left(400 - 449.6\right) = -8.5227$$

เมื่อใช้ $z_0 = -8.5227$ ซึ่งให้ผลการคำนวณครั้งที่ 3 ดังตารางที่ E8.7-1

ตารางที่ E8.7-1 ตารางประกอบตัวอย่างการคำนวณตัวอย่างที่ 8.7

การคำนวณครั้งที่ 1 h = 2 และ ลองค่า $z_0 = -5$

รอบที่	x_i	z_i	T_i	dz/dx	dT/dx	x_{i+1}	z_{i+1}	T_{i+1}
1	0	-5	300	5	-5	2	5	290
2	2	5	290	4.5	5	4	14	300
3	4	14	300	5	14	6	24	328
4	6	24	328	6.4	24	8	36.8	376
5	8	36.8	376	8.8	36.8	10	54.4	449.6

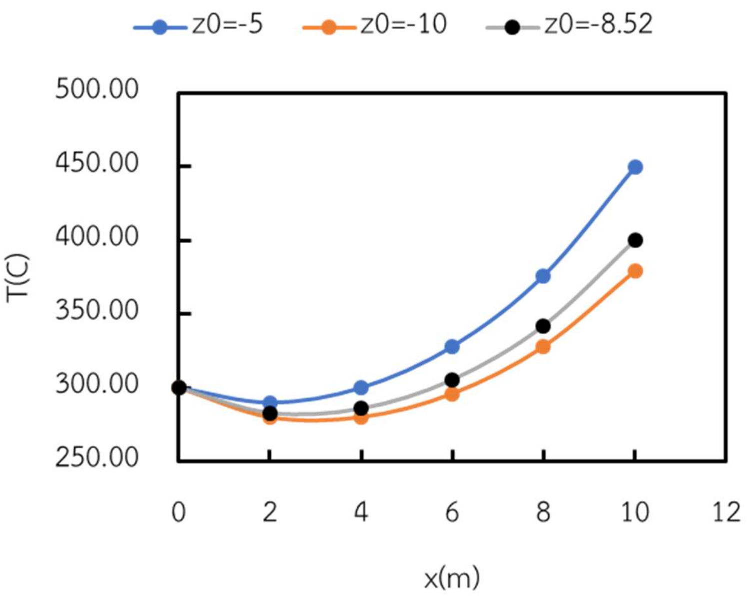
ตารางที่ E8.7-1 ตารางประกอบตัวอย่างการคำนวณตัวอย่างที่ 8.7 (ต่อ)

การคำนวณครั้งที่ 2 h = 2 และ ลองค่า $z_0 = -10$

รอบที่	x_i	z_i	T_i	dz/dx	dT/dx	x_{i+1}	z_{i+1}	T_{i+1}
1	0	-10	300	5	-10	2	0	280
2	2	0	280	4	0	4	8	280
3	4	8	280	4	8	6	16	296
4	6	16	296	4.8	16	8	25.6	328
5	8	25.6	328	6.4	25.6	10	38.4	379.2

การคำนวณครั้งที่ 3 h = 2 และ ลองค่า $z_0 = -8.5227$

round	x_i	z_i	T_i	dz/dx	dT/dx	x_{i+1}	z_{i+1}	T_{i+1}
1	0	-8.522727273	300	5	-8.522727	2	1.477273	282.9545
2	2	1.477272727	282.9545	4.147727	1.4772727	4	9.772727	285.9091
3	4	9.772727273	285.9091	4.295455	9.7727273	6	18.36364	305.4545
4	6	18.36363636	305.4545	5.272727	18.363636	8	28.90909	342.1818
5	8	28.90909091	342.1818	7.109091	28.909091	10	43.12727	400



รูปที่ E8.7-2 การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ระยะทางต่างๆ เมื่อค่า z เริ่มต้นต่างกัน

การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันดังนี้ ที่ $x = 0$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(0) = 300$ °C และที่ $x = 10$ ผนังมีอุณหภูมิ $T(10) = 400$ °C ที่ระยะทางต่างๆ แสดงในรูปที่ E8.7-2

กรณีปัญหาค่าขอบที่มีจุดขอบเป็นสมการเชิงอนุพันธ์

ตัวอย่างของปัญหาค่าขอบที่มีจุดขอบเป็นสมการเชิงอนุพันธ์ (Derivative Boundary Conditions) เช่น กรณีที่อัตราการถ่ายเทสความร้อนที่ผนังดังนี้ $-kA_C \left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0} = hA_C(T_\infty - T(0))$

ตัวอย่างที่ 8.8 จงหาการกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันดังนี้ ที่ $x=0$ m โดยพบว่า $\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0} = \frac{h}{k}(T(0)-T_\infty)$ และที่ $x=10$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(10)=400$ °C เมื่อสมการถ่ายเทความร้อนคือ $\frac{d^2T_x}{dx^2}+h'(T_\infty - T)=0$ ค่าคงที่ (h') เท่ากับ 0.05 m^{-2} ค่าสัมประสิทธิ์การถ่ายเทความร้อน (h) เท่ากับ 1 J/m^2-K-s ค่าการนำความร้อน (k) เท่ากับ 200 J/m-K-s และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C โดยให้ระยะห่างของ x เท่ากับ 2 m

วิธีทำ

กำหนดให้ $z=\frac{dT_x}{dx}$ ดังนั้น $\frac{dz}{dx}+h'(T_\infty - T)=0$ หรือ $\frac{dz}{dx}+0.05(200-T)=0$

ซึ่งจะได้เป็นระบบสมการที่มี 2 สมการ และสามารถใช้วิธีการประมาณแบบออยเลอร์ในการหาคำตอบ ดังนี้

$\frac{dT_x}{dx}=z$ ดังนั้น $T_{i+1}=T_i+f_1(z_i)h=T_i+z_ih$

$\frac{dz}{dx}=-0.05(200-T)$ ดังนั้น $z_{i+1}=z_i+f_2(x_i,z_i,T_i)h=z_i-0.05(200-T_i)h$

ตัวอย่างการคำนวณครั้งที่ 1 สมมุติให้ $T_0=300$ °C

ดังนั้น $z_0=\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0}=\frac{1}{200}(300-200)=0.5$

รอบ 1 เมื่อ $x_0=0$ m $T_0=300$ °C และ $z_0=0.5$

$x_1=x_0+h=0+2=2$ m

$T_1=T_0+z_0h=300+(0.5)2=301$ °C

$z_1=z_0-0.05(200-T_0)h=0.5-0.05(200-300)2=10.5$

รอบที่ 2 เมื่อ $x_1=2$ m $T_1=301$ °C และ $z_1=10.5$

$x_2=x_1+h=2+2=4$ m

$T_2=T_1+z_1h=301+(10.5)2=322$ °C

$z_2=z_1-0.05(200-T_1)h=10.5-0.05(200-301)2=20.6$

แทนค่าไปเรื่อยจน $x_5=10$ m ซึ่งจะได้ค่า $T_5=527.04$ °C และ $z_5=72$ ซึ่งพบว่า T_5 ที่ได้มีค่ามากกว่า $T(10)=400$ °C แสดงว่าค่า $T_0=300$ °C มีค่ามากเกินไป ดังนั้นในรอบการคำนวณต่อไปกำหนดให้ $T_0=250$ °C

ตัวอย่างการคำนวณครั้งที่ 2 สมมุติให้ $T_0 = 250\ ^\circ\text{C}$

จาก $z_0 = \left.\dfrac{dT}{dx}\right|_{x=0} = \dfrac{1}{200}(250-200) = 0.25$

รอบ 1 เมื่อ $x_0 = 0\,\text{m}\, T_0 = 250\ ^\circ\text{C}$ และ $z_0 = 0.25$

$x_1 = x_0 + h = 0 + 2 = 2\,\text{m}$

$T_1 = T_0 + z_0 h = 250 + (0.25)2 = 250.50\ ^\circ\text{C}$

$z_1 = z_0 - 0.05(200 - T_0)h = 0.25 - 0.05(200-250)2 = 5.25$

รอบที่ 2 เมื่อ $x_1 = 2\,\text{m}\, T_1 = 250.50\ ^\circ\text{C}$ และ $z_1 = 5.25$

$x_2 = x_1 + h = 2 + 2 = 4\,\text{m}$

$T_2 = T_1 + z_1 h = 250.50 + (5.25)2 = 261\ ^\circ\text{C}$

$z_2 = z_1 - 0.05(200 - T_1)h = 5.25 - 0.05(200-250.50)2 = 10.30$

แทนค่าไปเรื่อยจน $x_5 = 10$ m ซึ่งจะได้ค่า $T_5 = 363.52\ ^\circ\text{C}$ และ $z_5 = 36$ ซึ่งพบว่า T_5 ที่ได้มีค่าน้อยกว่า $T(10) = 400\ ^\circ\text{C}$ แสดงว่าค่า $T_0 = 250\ ^\circ\text{C}$ มีค่าน้อยไป ดังนั้น

แทนค่าไปเรื่อยจน $x_5 = 10\,\text{m}$ ซึ่งจะได้ค่า $T_5 = 363.52\ ^\circ\text{C}$ และ $z_5 = 36$ ซึ่งพบว่า T_5 ที่ได้มีค่าน้อยกว่า $T(10) = 400\ ^\circ\text{C}$

ดังนั้นสามารถหาค่า T_0 ได้จากสมการต่อไปนี้

$$\frac{\Delta T_a}{\Delta T_b} = \frac{T_{a2} - T_{a1}}{T_{b2} - T_{b1}}$$

$$T_a = T_{a1} + \frac{T_{a2} - T_{a1}}{T_{b2} - T_{b1}}\left(T_b - T_{b1}\right)$$

$$T_a = 300 + \frac{250-300}{363.52-527.04}\left(400-527.04\right) = 261.15\ ^\circ\text{C}$$

$$z = -5 + \frac{-10-(-5)}{379.2-449.6}\left(400-449.6\right) = -8.5227$$

ซึ่งเมื่อนำค่า T_0 เท่ากับ 261.15 °C และ $z_0 = -8.5227$ ไปคำนวณใหม่อีกรอบจะได้ผลการคำนวณครั้งที่ 3 ดังตารางที่ E8.8 -1

ตารางที่ E8.8-1 ตารางประกอบตัวอย่างการคำนวณตัวอย่างที่ 8.8

การคำนวณครั้งที่ 1 h=2 และให้ T(0) = 300°C

round	xi	Ti	zi	xi+1	Ti+1	zi+1
1	0	300	0.5	2	301	10.5
2	2	301	10.5	4	322	20.6
3	4	322	20.6	6	363.2	32.8
4	6	363.2	32.8	8	428.8	49.12
5	8	428.8	49.12	10	527.04	72

ตารางที่ E8.8-1 ตารางประกอบตัวอย่างการคำนวณตัวอย่างที่ 8.8 (ต่อ)

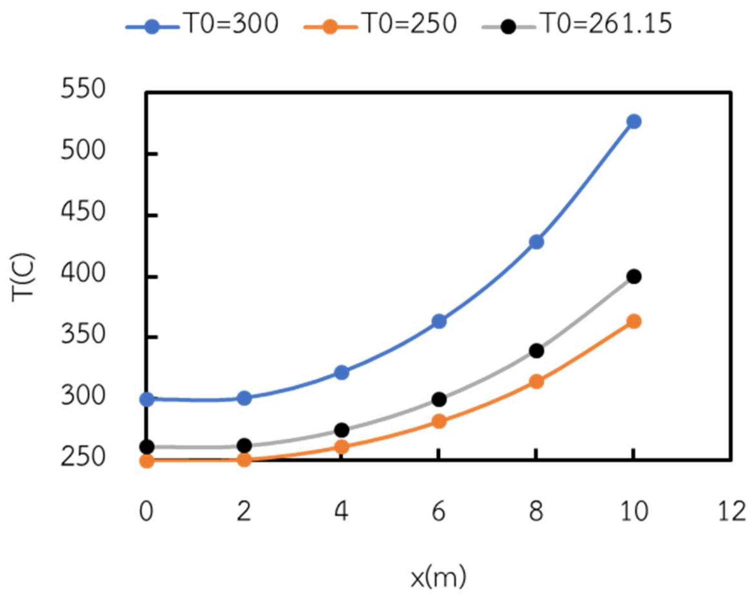
การคำนวณครั้งที่ 2 h=2 และให้ T(0) = 250°C

round	xi	Ti	zi	xi+1	Ti+1	zi+1
1	0	250.00	0.25	2	250.50	5.25
2	2	250.50	5.25	4	261.00	10.30
3	4	261.00	10.30	6	281.60	16.40
4	6	281.60	16.40	8	314.40	24.56
5	8	314.40	24.56	10	363.52	36.00

การคำนวณครั้งที่ 3 h=2 และให้ T(0) = 261.15°C

round	xi	Ti	zi	xi+1	Ti+1	zi+1
1	0	261.15	0.31	2	261.77	6.42
2	2	261.77	6.42	4	274.61	12.60
3	4	274.61	12.60	6	299.80	20.06
4	6	299.80	20.06	8	339.92	30.04
5	8	339.92	30.04	10	400.00	44.03

การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกัน ที่ $x = 0$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T_5 = 363.52$ °C และ $T(0) = 300$ °C และที่ $x = 10$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(10) = 400$ °C รูปที่ E8.8-1 แสดงผลของอุณหภูมิเริ่มต้นต่างกันต่อการหาอุณหภูมิของแท่งลวดที่ระยะทางต่างๆ



รูปที่ E8.8-1 การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ระยะทางต่างๆ เมื่อค่าอุณหภูมิเริ่มต้นต่างกัน

8.5 แบบฝึกหัดท้ายบท

ข้อ HM 8.1 ปฏิกิริยาของ A $\longrightarrow$ B เกิดในท่อที่มีความยาว 5 cm พบว่าความเข้มข้นของสาร A เปลี่ยนแปลงตามปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์ดังสมการ (HM8.1-1)

$$\frac{dV_{PFR}}{dx_A} = \frac{-r_A}{F_{A0}} \tag{HM8.1-1}$$

เมื่อ V_{PFR} คือปริมาตรเครื่องปฏิกรณ์ (m^3) x_A คือค่าคอนเวอร์ชันของสาร A $-r_A$ คืออัตราการหายไปของสาร A ($kmol/m^3$) ดังสมการ (HM8.1-2) และ F_{A0} คืออัตราการไหลเชิงโมลของสาร A ($kmol/m^3$)

$$-r_A = kC_{A0}^2 \frac{(1-x_A)^2}{(1-0.5x_A)^2} \tag{HM8.1-2}$$

เมื่อ k คือค่าคงที่ปฏิกิริยาเท่ากับ 0.1 m^3/kmol-min และ C_{A0} คือความเข้มข้นของสาร A ที่ทางเข้าเครื่องปฏิกรณ์ มีค่าเท่ากับ 1 $kmol/m^3$

จงหาปริมตราของเครื่องปฏิกรณ์ที่คอนเวอร์ชันของสาร A เท่ากับ 0.9 เมื่ออัตราการหายไปของสาร A ดังสมการ (HM8.1-2) และอัตราการไหลเชิงโมลของสาร A เท่ากับ 10 $kmol/m^3$ ด้วย

1. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของออยเลอร์ อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
2. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการค่ากลาง อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
3. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของฮวน อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
4. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการรุงกัตตา อย่างน้อยจำนวน 5 รอบ

ข้อ HM 8.2 ปฏิกิริยาการสังเคราะห์ C และ D ในวัฏภาคของเหลว มีสมการปฏิกิริยาเคมีดังนี้ $A + B \to C$ และ $A + C \to D$ โดยมีอัตราการเกิดปฏิกิริยาของสารต่างๆ ดังนี้และมีหน่วยเป็น mol/L-min

$$r_A = -k_{1A}C_AC_B - k_{2C}C_AC_C$$

$$r_B = -k_{1A}C_AC_B$$

$$r_C = k_{1A}C_AC_B - k_{2C}C_AC_C$$

เมื่อความเข้มข้นขาเข้าของสาร A B และ C มีค่าเท่ากับ 1 1 และ 0.5 mol/L อัตราการไหลเชิงปริมาตรเท่ากับ 1 L/min และค่าคงที่ปฏิกิริยา $k_{1A} = 0.1$ L/mol-min และ $k_{2C} = 0.25$ L/mol-min เมื่อ $v_0 \frac{dC_A}{dV} = r_A$, $v_0 \frac{dC_B}{dV} = r_B$ และ $v_0 \frac{dC_C}{dV} = r_C$ เช่นสมการ $v_0 \frac{dC_A}{dV} = r'_A = -k_{1A}C_AC_B - k_{2C}C_AC_C$

จงหาความเข้มข้นของสาร A B และ C ที่ทางออกของเครื่องปฏิกรณ์แบบท่อไหลที่มีขนาด 1 L พร้อมเขียนกราฟความเข้มข้นของสารต่างๆ ที่ระยะของขนาดเครื่องปฏิกรณ์ต่างๆ ด้วย

1. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของออยเลอร์ อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
2. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการค่ากลาง อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
3. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของฮวน อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ

4. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการรุงกัตตา อย่างน้อยจำนวน 5 รอบ

ข้อ HM 8.3 ปฏิกิริยาของ A $\rightarrow$ B เกิดในท่อที่มีความยาว 5 cm พบว่าความเข้มข้นของสาร A เปลี่ยนแปลงตามระยะทาง x เป็นสมการต่อดังนี้ $D\frac{d^2C_A}{dx^2} - kC_A = 0$ เมื่อ D คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ ($2.5\text{x}10^{-6}$ cm^2/s) k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา ($5\text{x}10^{-6}$ s^{-1}) x คือระยะทางภายในท่อ (m) และ C_A คือความเข้มข้นของสาร A (mol/L) เมื่อ x = 0 cm พบว่า C_A = 0.1 mol/L และ x = 5 cm พบว่า C_A = 0 mol/L จงเขียนกราฟความเข้มของสาร A ที่ต่างๆ เมื่อคำนวณด้วยวิธีการต่อไปนี้

1. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของออยเลอร์ อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
2. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการค่ากลาง อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ
3. วิธีการประมาณค่าด้วยวิธีการของฮวน อย่างน้อยจำนวน 20 รอบ

8.6 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. H. Scott Fogler, Elements of chemical reaction engineering (Fifth Edition), Pearson College, 2016

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 13

หัวข้อการสอน

บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด หัวข้อ 9.1 – 9.3

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตมีความรู้เบื้องต้นเกี่ยวกับปัญหาที่จำเป็นต้องการการประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆด้วยวิธีการประมาณค่า

3. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการใช้ระเบียบวิธีผลต่างจำกัดในการหาผลเฉลย

เนื้อหา

1. บทนำ

2. การหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ

3. ระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี

2. เอกสารนำเสนอ Power Point

3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD

4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 14

หัวข้อการสอน

บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด หัวข้อ 9.4

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยวิธีผลต่างจำกัด

เนื้อหา

1. การแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยวิธีผลต่างจำกัด

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. สอนบรรยายเนื้อหาตามหัวข้อต่างๆ	120 นาที
3. นิสิตซักถามและทำใช้ excel ในการแก้ปัญหา	50 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี
2. เอกสารนำเสนอ Power Point
3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD
4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บทที่ 9 การประมาณค่าอนุพันธ์และระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

9.1 บทนำ

ปัญหาทางวิศวกรรมมักมีปัญหาการหาค่าอนุพันธ์ (Numerical Differentiation) ตัวอย่างเช่นในการหาอันดับการเกิดปฏิกิริยาจำเป็นต้องหาค่าอัตราการการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร A ต่อเวลา หรืออยากทราบค่าอนุพันธ์ที่เวลาต่างๆ แต่มีผลการทดลองที่ทำการวัดความเข้มข้นของสาร A ที่เวลาต่างๆ ซึ่งอนุพันธ์อันดับต่างๆ

รูปสมการอนุพันธ์โดยทั่วไปคือ $\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x}$

เมื่อ $\Delta x \to 0$ ดังนั้น

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_1 + \Delta x) - f(x_1)}{\Delta x}$$

9.2 การหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ

9.2.1 การหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

ในการหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งสามารถใช้อนุกรมเทร์เลอร์ที่ใช้ในการคำนวณเป็นฟังก์ชันที่ตำแหน่ง x_{i+1} จากค่าต่างๆ ของ x_i ดังสมการ (9.1)

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + f''(x_i)\frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} + \ldots + f^n(x_i)\frac{(x_{i+1} - x_i)^n}{n!} + \ldots \qquad (9.1)$$

ถ้าแทน $h = (x_{i+1} - x_i)$

ดังนั้นสำหรับอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

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

สำหรับกรณีการหาค่าอนุพันธ์แบบไปข้างหน้า (Forward Difference)

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

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

ถ้ากำหนดให้ $O(h) = -f''(x_i)\frac{h}{2!} - \ldots - f^n(x_i)\frac{h^{n-1}}{n!} - \ldots$ ซึ่ง $O(h)$ คือส่วนที่เหลือจากการตัดอนุกรมเทย์เลอร์

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

สมการแสดงการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งได้เป็นสมการ (9.1)

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \tag{9.1}$$

ซึ่งเป็นการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบไปข้างหน้า

สำหรับกรณีการหาค่าอนุพันธ์แบบย้อนกลับ (Backward Difference)

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

ถ้า $-h = (x_i - x_{i-1})$ ดังนั้น

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2!} - f^3(x_i)\frac{h^3}{3!} + \ldots + f^n(x_i)\frac{(-h)^n}{n!} + \ldots$$

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

สมการแสดงการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบย้อนกลับ ดังสมการ (9.2)

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \tag{9.2}$$

สำหรับกรณีการหาค่าอนุพันธ์แบบตรงกลาง (Centered Difference)

จาก

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

และ

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + f''(x_i)\frac{h^2}{2!} - f^3(x_i)\frac{h^3}{3!} + \ldots + f^n(x_i)\frac{(-h)^n}{n!} + \ldots$$

หรือ

$$f(x_i) = f(x_{i-1}) + f'(x_i)h - f''(x_i)\frac{h^2}{2!} + f^3(x_i)\frac{h^3}{3!} + \ldots + f^n(x_i)\frac{(-h)^n}{n!} + \ldots$$

บวกสมการจะได้

$$f(x_{i+1}) = f(x_{i-1}) + 2f'(x_i)h + 2f^3(x_i)\frac{h^3}{3!} + \ldots$$

หรือ

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

สมการแสดงการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบตรงกลาง ดังสมการ (9.3)

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2} \tag{9.3}$$

9.2.2 การหาค่าอนุพันธ์อันดับสอง

ในการหาค่าอนุพันธ์อันดับสองสามารถใช้วิธีการเช่นเดียวกันกับอนุพันธ์อันดับหนึ่ง โดยใช้อนุกรมเทร์เลอร์ที่ใช้ในการคำนวณเป็นฟังก์ชันที่ตำแหน่ง x_{i+2} จากค่าต่างๆ ของ x_i

เมื่อ $h = x_{i+1} - x_i$ ดังนั้น $2h = x_{i+2} - x_i$

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

จากสมการ

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

ถ้าเอา 2 คูณ

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

นำไปลบกับสมการข้างบน

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

หรือ

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

ซึ่งเรียกว่าค่าอนุพันธ์อันดับสองไปข้างหน้า

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \qquad (9.4)$$

สำหรับค่าอนุพันธ์อันดับสองย้อนกลับ

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} \qquad (9.5)$$

สำหรับค่าอนุพันธ์อันดับสองตรงกลาง

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} \qquad (9.6)$$

9.2.3 การหาค่าอนุพันธ์ที่มีความแม่นยำสูงขึ้น

การหาค่าอนุพันธ์ที่มีความแม่นยำสูงขึ้นสามารถทำได้โดยการประยุกต์ใช้อนุกรมเทย์เลอร์จากสมการ (9.1) สำหรับการหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งถ้าขยายถึงพจฯที่เป็นอนุพันธ์อันดับสองจะได้เป็นสมการ (9.7)

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

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

$$f'(x_i)h = f(x_{i+1}) - f(x_i) - f''(x_i)\frac{h^2}{2!} \qquad (9.7)$$

เมื่อแทน $f''(x_i)$ จากสมการ (9.4) ลงในสมการ (9.7) จะได้เป็นสมการ (9.8)

$$f'(x_i)h = f(x_{i+1}) - f(x_i) - \left(\frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}\right)\frac{h^2}{2}$$

$$f'(x_i)h = f(x_{i+1}) - f(x_i) - \left(\frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}\right)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} \tag{9.8}$$

สูตรสำหรับการหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ สำหรับการประมาณค่าแบบไปข้างหน้าได้ดังนี้

อนุพันธ์อันดับหนึ่ง

สูตรทั่วไป $f'(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$

สูตรปรับปรุง $f'(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$

อนุพันธ์อันดับสอง

สูตรทั่วไป $f''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}$

สูตรปรับปรุง $f''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2}$

อนุพันธ์อันดับสาม

สูตรทั่วไป $f'''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3}$

สูตรปรับปรุง $f'''(x_i) = \dfrac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3}$

อนุพันธ์อันดับสี่

สูตรทั่วไป $f''''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4}$

สูตรปรับปรุง $f''''(x_i) = \dfrac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4}$

สูตรสำหรับการหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ สำหรับการประมาณค่าแบบไปย้อนกลับได้ดังนี้

อนุพันธ์อันดับหนึ่ง

สูตรทั่วไป $f'(x_i) = \dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$

สูตรปรับปรุง $f'(x_i) = \dfrac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h}$

อนุพันธ์อันดับสอง

สูตรทั่วไป $f''(x_i) = \dfrac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}$

สูตรปรับปรุง $f''(x_i) = \dfrac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2}$

อนุพันธ์อันดับสาม

สูตรทั่วไป $f'''(x_i) = \dfrac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^3}$

สูตรปรับปรุง $f'''(x_i) = \dfrac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3}$

อนุพันธ์อันดับสี่

สูตรทั่วไป $f''''(x_i) = \dfrac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4}$

สูตรปรับปรุง $f''''(x_i) = \dfrac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5})}{h^4}$

สูตรสำหรับการหาค่าอนุพันธ์อันดับต่างๆ สำหรับการประมาณค่าแบบตรงกลางได้ดังนี้

อนุพันธ์อันดับหนึ่ง

สูตรทั่วไป $f'(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{h}$

สูตรปรับปรุง $f'(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h}$

อนุพันธ์อันดับสอง

สูตรทั่วไป $f''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$

สูตรปรับปรุง $f''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2}$

อนุพันธ์อันดับสาม

สูตรทั่วไป $f'''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3}$

สูตรปรับปรุง $f'''(x_i) = \dfrac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3}$

อนุพันธ์อันดับสี่

สูตรทั่วไป $f''''(x_i) = \dfrac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^4}$

สูตรปรับปรุง

$$f''''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) - 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{6h^4}$$

ตัวอย่างที่ 9.1 จากข้อมูลการทดลองการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร A ที่เวลาต่างๆ ให้ผลการทดลองดังตารางที่ E9.1-1 จงหาค่าอันดับปฏิกิริยาซึ่งหาได้จากสมการ (E9.1-1)

$$\ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right) = \ln k + \alpha \ln C_A \tag{E9.1-1}$$

เมื่อ C_A คือความเข้มข้นของสาร A ที่เวลา t (mol/L) k คือค่าคงที่ปฏิกิริยา (min) และ α คืออันดับปฏิกิริยา

ตารางที่ E9.1-1 ข้อมูลการทดลองการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร A ที่เวลาต่างๆ

เวลา (min)	0	50	100	150	200	250	300
ความเข้มข้นของสาร A (mol/L)	50x10^{-3}	38x10^{-3}	30.6x10^{-3}	25.6x10^{-3}	22.2x10^{-3}	19.5x10^{-3}	17.4x10^{-3}

วิธีทำ

เนื่องจาก $\frac{dC_A}{dt}$ คืออนุพันธ์ดันดับหนึ่ง ดังนั้นสามารถหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบไปข้างหน้าโดยใช้สูตรทั่วไปสำหรับข้อมูลที่อยู่ระหว่างข้อมูล ในขณะที่จุดเริ่มต้นและจุดปลายใช้สูตรปรับปรุงสำหรับหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบไปข้างหน้า เพื่อให้ได้ค่าอนุพันธ์ที่มีความคลาดเคลื่อนต่ำ ซึ่งให้ผลการคำนวณดังตารางที่ E9.1-2

สำหรับจุดแรก

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$$

สำหรับจุดสุดท้าย

$$f'(x_i) = \frac{-3f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - f(x_i)}{2h}$$

ตารางที่ E9.1-2 ผลการคำนวณหาค่าอนุพันธ์ $\frac{dC_A}{dt}$

เวลา (min)	**ความเข้มข้นของสาร A (mol/L)**	$\frac{dC_A}{dt}$
0	5.00x10^{-2}	-2.86 x10^{-2}
50	3.80 x10^{-2}	-2.40 x10^{-2}
100	3.06 x10^{-2}	-1.48 x10^{-2}
150	2.56 x10^{-2}	-1.00 x10^{-2}
200	2.22 x10^{-2}	-6.80 x10^{-2}
250	1.95 x10^{-2}	-5.40 x10^{-2}
300	1.74 x10^{-2}	3.60 x10^{-2}

เพื่อหาค่าของอันดับปฏิกิริยาจะใช้วิธีการถดถอยกำลังสองเชิงเส้น ซึ่งให้ผลการคำนวณดังตารางที่ตารางที่ E9.1-3 เมื่อใช้สมการเส้นตรงในการทำนาย เพื่อให้ง่ายกำหนดให้ $y = \ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right)$ $x = \ln C_A$ $a_0 = \ln k$ และ $a_1 = \alpha$ ดังนั้นสมการ (E9.1-1) ได้เป็นสมการ (E9.1-2)

$$y = a_0 + a_1 x \qquad \text{(E9.1-2)}$$

วิธีการถดถอยกำลังสองเชิงเส้น จำเป็นต้องหาค่าต่อไปนี้ $\sum_{i=1}^{n} y_i$ $\sum_{i=1}^{n} x_i$ $\sum_{i=1}^{n} y_i x_i$ และ $\sum_{i=1}^{n} x_i^2$ เมื่อ n เท่ากับ 7 ดังตารางที่ E9.1-3

ตารางที่ E9.1-3 ผลการคำนวณตามวิธีการถดถอยกำลังสองเชิงเส้น

n	$x = \ln C_A$	$y = \ln\left(-\frac{dC_A}{dt}\right)$	x^2	xy
1	-3.00	-8.16	8.97	24.44
2	-3.27	-8.33	10.69	27.26
3	-3.49	-8.82	12.16	30.75
4	-3.67	-9.21	13.43	33.76
5	-3.81	-9.60	14.50	36.54
6	-3.94	-9.83	15.50	38.69
7	-4.05	-10.23	16.41	41.45
sum	-25.21	-64.18	91.67	232.89

เขียนตามรูปเมทริต์ได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 7 & -25.21 \\ -25.21 & 91.67 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -64.18 \\ 232.89 \end{bmatrix}$$

ซึ่งจะได้ค่า a_0 และ a_1 ดังนี้

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.9023 \\ 2.0172 \end{bmatrix}$$

ดังนั้นอันดับปฏิกิริยาเท่ากับ 2.0172

9.2.4 การหาค่าอนุพันธ์ย่อย

การหาค่าอนุพันธ์ย่อยอันดับหนึ่งสามารถประยุกต์จากใช้การหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งแบบตรงกลางดังสมการ (9.10) และ (9.11)

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x-\Delta x, y)}{2\Delta x} \tag{9.10}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f(x, y+\Delta y) - f(x, y-\Delta y)}{2\Delta y} \tag{9.11}$$

สำหรับค่าอนุพันธ์ย่อยอันดับสูงกว่าสามารถใช้การค่าอนุพันธ์เชิงสามัญได้ เช่น $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)$

ซึ่งสามารถเขียนได้เป็น

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\dfrac{\partial f}{\partial y}(x+\Delta x, y) - \dfrac{\partial f}{\partial y}(x-\Delta x, y)}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\dfrac{f(x+\Delta x, y+\Delta y) - f(x+\Delta x, y-\Delta y)}{2\Delta y} - \dfrac{f(x-\Delta x, y+\Delta y) - f(x-\Delta x, y-\Delta y)}{2\Delta y}}{2\Delta x}$$

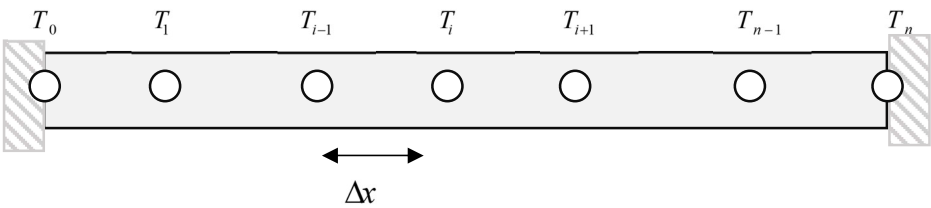
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{f(x+\Delta x, y+\Delta y) - f(x+\Delta x, y-\Delta y) - f(x-\Delta x, y+\Delta y) + f(x-\Delta x, y-\Delta y)}{4\Delta x \Delta y}$$

9.3 ระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

ระเบียบวิธีผลต่างจำกัด (Finite-Difference Methods) เป็นวิธีการประยุกต์การเปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์สามัญและสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยให้อยู่ในรูปแบบของการประมาณค่าอนุพันธ์

9.3.1 การแก้ปัญหาของสมการอนุพันธ์เชิงสามัญ

ตัวอย่างของปัญหาที่สามารถเขียนแบบจำลองด้วยสมการอนุพันธ์เชิงสามัญเช่น การถ่ายเทความร้อนในแท่งลวดที่วางระหว่างผนังเมื่อระยะทางเท่ากับ 0 m ผนังมีอุณหภูมิ T_0 °C และระยะทางเท่ากับ x m ผนังมีอุณหภูมิ T_n °C และมีสมการอนุพันธ์ดังสมการ (9.12)



รูปที่ 9.1 จุดที่ใช้ในการคำนวณปัญหาการถ่ายเทความร้อนในแท่งลวดที่ระยะทางต่างๆ
ที่มา: Chapra (2010)

$$\frac{d^2 T_x}{dx^2} + h'(T_\infty - T) = 0 \tag{9.12}$$

เมื่อแทนสมการด้วยการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับสองแบบตรงกลางได้ดังนี้

$$\frac{d^2 T_x}{dx^2} = \frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{\Delta x^2}$$

ดังนั้นสมการ (9.12) ได้เป็นสมการ (9.13)

$$\frac{T_{i-1} - 2T_i + T_{i+1}}{\Delta x^2} + h'(T_\infty - T) = 0$$

หรือ

$$-T_{i-1}+(2+h'\Delta x^2)T_i-T_{i+1}=h'\Delta x^2 T_\infty \qquad (9.13)$$

ซึ่งจะเห็นรูปแบบสมการ (9.13) ที่จุด x_i ต่างจะสามารถเขียนให้อยู่ในรูปเมทิกต์ได้ ดังนั้นในการแก้ปัญหาสามารถใช้วิธีการเมทริกต์แถบได้

ตัวอย่าง 9.2 จงหาการกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันดังนี้ ที่ $x=0$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(0)=300^\circ C$ และที่ $x=10$ m ผนังมีอุณหภูมิ $T(10)=400$ °C เมื่อมีสมการถ่ายเทความร้อนคือ $\frac{d^2T}{dx^2}+h'(T_\infty-T)=0$ เมื่อค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C โดยให้ระยะห่างของ x เท่ากับ 2 m ด้วยระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

วิธีทำ

จากสมการ $\frac{d^2T}{dx^2}+h'(T_\infty-T)=0$

โดยเลือกใช้การประมาณค่าอนุพันธ์อันดับสองแบ่งครึ่ง

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

ดังนั้น

$$\frac{d^2T_x}{dx^2}=\frac{T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}}{\Delta x^2}$$

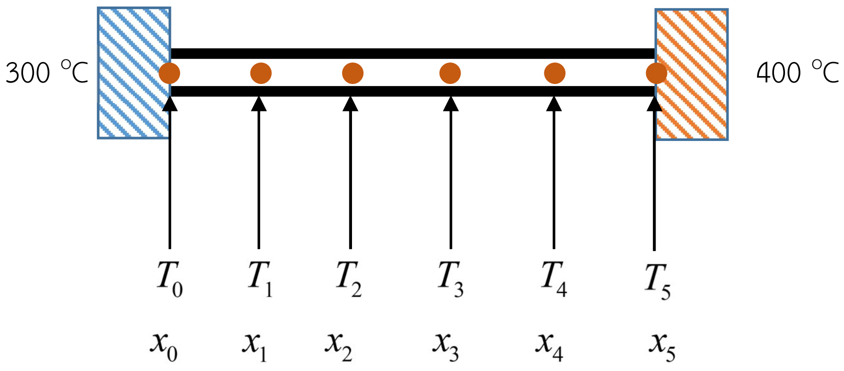
ดังนั้น

$$\frac{T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}}{\Delta x^2}+h'(T_\infty-T)=0$$

$$T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}+h'(T_\infty-T)=0$$

$$T_{i+1}-(2+h'\Delta x^2)T_i+T_{i-1}=-h'\Delta x^2 T_\infty \text{ หรือ } T_{i-1}-(2+h'\Delta x^2)T_i+T_{i+1}=-h'\Delta x^2 T_\infty$$

แทนค่าค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C เมื่อ Δx เท่ากับ 2 m $T(0)$ และ $T(10)$ เท่ากับ 300 และ 400 °C ตามลำดับ กำหนดให้ระยะ x_0 เท่ากับ 0 m มีอุณหภูมิเป็น T_0 เท่ากับ 300 °C ระยะ x_1 เท่ากับ 2 m มีอุณหภูมิเป็น T_1 °C, ระยะ x_2 เท่ากับ 4 m มีอุณหภูมิเป็น T_2 °C, ระยะ x_3 เท่ากับ 6 m มีอุณหภูมิเป็น T_3 °C, ระยะ x_4 เท่ากับ 8 m มีอุณหภูมิเป็น T_4 °C และระยะ x_5 เท่ากับ 10 m มีอุณหภูมิเป็น T_5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ 400 °C ดังรูปที่ E9.2-1



รูปที่ E9.2-1 รูปประกอบตัวอย่างที่ 9.2

ที่มา: Chapra (2010)

$T_{i-1} - (2 + 0.05(2)^2)T_i + T_{i+1} = -0.05(2^2)200$

$T_{i-1} - 2.2T_i + T_{i+1} = -40$ หรือ $-T_{i-1} + 2.2T_i - T_{i+1} = 40$

เมื่อระยะห่างระหว่างจุด (h) เท่ากับ 2 m

ที่ระยะ x เท่ากับ 2 m ดังนั้น $-T_0 + 2.2T_1 - T_2 = 40$ แต่ $T_0 = 300$ °C ดังนั้น $-300 + 2.2T_1 - T_2 = 40$

หรือดังนั้น $2.2T_1 - T_2 = 340$

ที่ระยะ x เท่ากับ 4 m ดังนั้นที่ระยะ x เท่ากับ 4 m ดังนั้น$-T_1 + 2.2T_2 - T_3 = 40$

ที่ระยะ x เท่ากับ 6 m ดังนั้น $-T_2 + 2.2T_3 - T_4 = 40$

ที่ระยะ x เท่ากับ 8 m ดังนั้น $-T_3 + 2.2T_4 - T_5 = 40$ แต่ $T_5 = 400$ °C ดังนั้น $-400 + 2.2T_1 - T_2 = 40$

หรือดังนั้น $-T_3 + 2.2T_4 = 440$

นำไปเขียนในรูปเมตริกซ์ได้เป็น

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2.2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2.2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 340 \\ 40 \\ 40 \\ 440 \end{bmatrix}$$

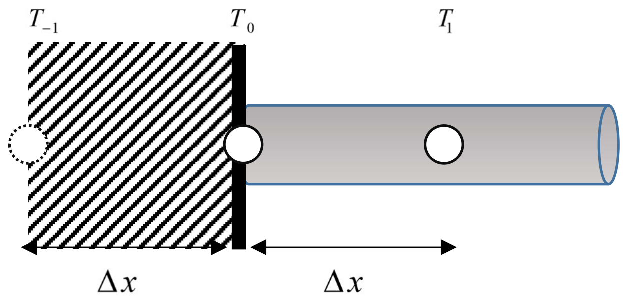
เนื่องจากเป็นเมทริกซ์แบบแถบดังนั้นสามารถลดรูปได้เป็น

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1.7454 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1.6708 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1.6015 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 340 \\ 194.5455 \\ 151.4586 \\ 530.6493 \end{bmatrix}$$

ดังนั้นอุณหภูมิที่ตำแหน่ง x เท่ากับ 2 4 6 และ 8 m มีค่าเท่ากับ $T_1 = 283.2666^oC$, $T_2 = 283.1853^oC$, $T_3 = 299.7416^oC$ และ $T_4 = 336.2462^oC$ ตามลำดับ

กรณีปัญหาค่าขอบที่มีจุดขอบเป็นสมการอนุพันธ์

จากที่ได้ล่าวในบทที่ 8 มาก่อนหน้านี้ ในบทนี้สำหรับปัญหาค่าขอบที่อยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ เช่น $\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0} = T_a^{'}$ สามารถเปลี่ยนให้อยู่ในรูปการประมาณค่าอนุพันธ์แบบตรงกลางได้ดังแสดงในรูปที่ 9.2 และสมการ (9.14)



รูปที่ 9.2 การแสดงจุดที่ใช้ในการหาค่า $\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0} = T_a^{'}$

ที่มา: Chapra (2010)

$$\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0} = T_a^{'} = \frac{T_1 - T_{-1}}{2\Delta x} \tag{9.14}$$

ตัวอย่างที่ 9.3 การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันเมื่อที่ผนังด้านหนึ่ง ($x = 0$ m) พบว่าอัตราการถ่ายเทความร้อนที่ผนังมีค่าเท่ากับ -20 °C/m ($\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0}$) และที่ผนังอีกด้าน (x เท่ากับ 10 m) อุณหภูมิของผนังเป็น 400 °C เมื่อการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิภายในแท่งขวดลวดสามารถอธิบายด้วยสมการถ่ายเทความร้อนคือ $\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_\infty - T) = 0$ ค่าคงที่ของ h’ เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C จงหาอุณหภูมิภายในแท่งขดลวดที่ระยะทางต่างๆ เมื่ระยะห่างระหว่างจุดเท่ากับ 2 m ด้วยระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

วิธีทำ

จากสมการ $\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_\infty - T) = 0$

โดยเลือกใช้การประมาณค่าอนุพันธ์อันดับสองแบ่งครึ่ง

$$f^{"}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$$

ดังนั้น

$$\frac{d^2T_x}{dx^2}=\frac{T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}}{\Delta x^2}$$

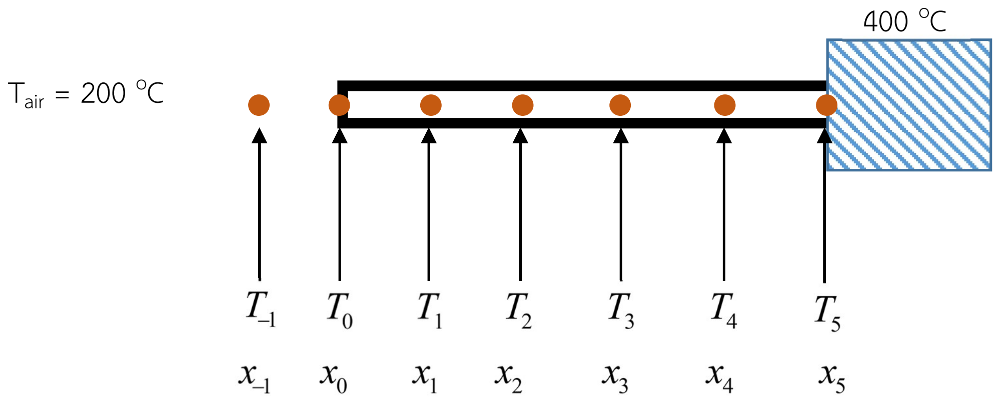
ดังนั้น

$$\frac{T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}}{\Delta x^2}+h'(T_\infty-T)=0$$

$$T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}+h'(T_\infty-T)=0$$

$T_{i+1}-(2+h'\Delta x^2)T_i+T_{i-1}=-h'\Delta x^2T_\infty$ หรือ $T_{i-1}-(2+h'\Delta x^2)T_i+T_{i+1}=-h'\Delta x^2T_\infty$

แทนค่าค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C เมื่อ Δx เท่ากับ 2 m กำหนดให้ระยะ x_0 เท่ากับ 0 m มีอัตราการถ่ายเทความร้อนที่ผนังมีค่าเท่ากับ -20 °C/m ระยะ x_1 เท่ากับ 2 m มีอุณหภูมิเป็น T_1 °C, ระยะ x_2 เท่ากับ 4 m มีอุณหภูมิเป็น T_2 °C, ระยะ x_3 เท่ากับ 6 m มีอุณหภูมิเป็น T_3 °C, ระยะ x_4 เท่ากับ 8 m มีอุณหภูมิเป็น T_4 °C และระยะ x_5 เท่ากับ 10 m มีอุณหภูมิเป็น T_5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ 400 °C ดังรูปที่ E9.3-1



รูปที่ E9.3-1 รูปประกอบตัวอย่างที่ 9.3

ที่มา: Chapra (2010)

ที่ระยะ x เท่ากับ 0 m พบว่า $\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0}$ เท่ากับ -20 °C/m ดังนั้น

$\left.\frac{dT}{dx}\right|_{x=0}=\frac{T_1-T_{-1}}{2\Delta x}=-20$ แทนค่า $T_1-T_{-1}=-20(2\Delta x)=-80$ หรือ $T_{-1}=T_1+80$

และ $T_{-1}+2.2T_0-T_1=40$ แทนค่า T_{-1} จะได้เป็น $T_1+80-2.2T_0+T_1=-40$ หรือ $2.2T_0-2T_1=120$

ดังนั้น

ที่ระยะ x เท่ากับ 0 m ดังนั้น $2.2T_0-2T_1=120$

ที่ระยะ x เท่ากับ 2 m ดังนั้น $-T_0+2.2T_1-T_2=40$

ที่ระยะ x เท่ากับ 4 m ดังนั้น $-T_1+2.2T_2-T_3=40$

ที่ระยะ x เท่ากับ 6 m ดังนั้น $-T_2+2.2T_3-T_4=40$

ที่ระยะ x เท่ากับ 8 m ดังนั้น $-T_3+2.2T_4-T_5=40$ แต่ T_5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ 400 °C

ดังนั้น $T_3-2.2T_4+400=-40$ ดังนั้น $-T_3+2.2T_4=400$

นำไปเขียนในรูปเมทริกต์ได้เป็น

$$\begin{bmatrix}2.2 & -2 & 0 & 0 & 0\\ -1 & 2.2 & -1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2.2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}T_0\\ T_1\\ T_2\\ T_3\\ T_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}120\\ 40\\ 40\\ 40\\ 440\end{bmatrix}$$

เนื่องจากเป็นเมทริกต์แบบแถบดังนั้นสามารถลดรูปได้ดังนี้

1. คูณ 1 แถวที่ 1 และคูณ 2.2 แถวที่ 2 เพื่อนกำจัด e_2

$$\begin{bmatrix}2.2(1) & -2(1) & 0(1) & 0(1) & 0(1)\\ -1(2.2) & 2.2(2.2) & -1(2.2) & 0(2.2) & 0(2.2)\\ 0 & -1 & 2.2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}T_0\\ T_1\\ T_2\\ T_3\\ T_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}120(1)\\ 40(2.2)\\ 40\\ 40\\ 440\end{bmatrix}$$

จะได้

$$\begin{bmatrix}2.2 & -2 & 0 & 0 & 0\\ -2.2 & 4.84 & -2.2 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2.2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}T_0\\ T_1\\ T_2\\ T_3\\ T_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}120\\ 88\\ 40\\ 40\\ 440\end{bmatrix}$$

แล้วนำแถวที่ 2 บวกกับแถวที่ 1 จะได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix}2.2 & -2 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2.2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}T_0\\ T_1\\ T_2\\ T_3\\ T_4\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}120\\ 208\\ 40\\ 40\\ 440\end{bmatrix}$$

2. คูณ 1 แถวที่ 2 และคูณ 2.84 แถวที่ 3 เพื่อนกำจัด e_3

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2(1) & 2.84(1) & 0(1) & 0(1) & 0(1) \\ 0(2.84) & -1(2.84) & 2.2(2.84) & -1(2.84) & 0(2.84) \\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208(1) \\ 40(2.84) \\ 40 \\ 440 \end{bmatrix}$$

จะได้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & -2.84 & 6.248 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2.2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 113.6 \\ 40 \\ 440 \end{bmatrix}$$

แล้วนำแถวที่ 3 บวกกับแถวที่ 2 จะได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6.0656 & -4.048 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 483.52 \\ 440 \end{bmatrix}$$

3. คูณ 1 แถวที่ 3 และคูณ 4.048 แถวที่ 4 เพื่อนกำจัด e_4

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0(1) & 0(1) & 4.048(1) & -2.84(1) & 0(1) \\ 0(4.048) & 0(4.048) & -1(4.048) & 2.2(4.048) & -1(4.048) \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6(1) \\ 40(4.048) \\ 440 \end{bmatrix}$$

จะได้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & -4.048 & 8.9056 & -4.048 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 161.92 \\ 440 \end{bmatrix}$$

แล้วนำแถวที่ 4 บวกกับแถวที่ 3 จะได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6.0656 & -4.048 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2.2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 483.52 \\ 440 \end{bmatrix}$$

คูณ 1 แถวที่ 4 และคูณ 6.0656 แถวที่ 5 เพื่อนกำจัด e_5

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0(1) & 0(1) & 0(1) & 6.0656(1) & -4.048(1) \\ 0(6.0656) & 0(6.0656) & 0(6.0656) & -1(6.0656) & 2.2(6.0656) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 483.52(1) \\ 440(6.0656) \end{bmatrix}$$

จะได้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2.2 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6.0656 & -4.048 \\ 0 & 0 & 0 & -6.0656 & 13.34432 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 483.52 \\ 2668.864 \end{bmatrix}$$

แล้วนำแถวที่ 4 บวกกับแถวที่ 3 จะได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 2.2 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2.84 & -2.2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4.048 & -2.84 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6.0656 & -4.048 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9.29632 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_0 \\ T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 120 \\ 208 \\ 321.6 \\ 483.52 \\ 3152.384 \end{bmatrix}$$

จากนั้นทำการแทนค่าย้อนกลับเพื่อหาอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ

1. หาอุณหภูมิ T_4

จาก $9.29632T_4 = 3152.384$ ดังนั้น

$$T_4 = \frac{3152.384}{9.29632} = 339.1002\ ^\circ\text{C}$$

2. หาอุณหภูมิ T_3

จาก $6.0656T_3 - 4.048T_4 = 483.52$ ดังนั้น

$$T_3 = \frac{483.52 + 4.048T_4}{9.29632} = \frac{483.52 + 4.048 \times 339.1002}{9.29632} = 306.0304\ ^\circ\text{C}$$

3. หาอุณหภูมิ T_2

จาก $4.048T_2 - 2.84T_3 = 321.60$ ดังนั้น

$$T_2 = \frac{321.60 + 2.84T_3}{4.048} = \frac{321.60 + 2.84 \times 306.0304}{4.048} = 294.1448 \text{ °C}$$

4. หาอุณหภูมิ T_1

จาก $2.84T_1 - 2.2T_2 = 208$ ดังนั้น

$$T_1 = \frac{208 + 2.2T_2}{2.84} = \frac{208 + 2.2 \times 294.1448}{2.84} = 301.0981 \text{ °C}$$

5. หาอุณหภูมิ T_0

จาก $2.2T_0 - 2T_1 = 120$ ดังนั้น

$$T_0 = \frac{120 + 2T_1}{2.2} = \frac{120 + 2 \times 301.0981}{2.2} = 328.2710$$

$$T_0 = 328.2710 \text{ °C}$$

ดังนั้นจะได้ว่าที่ระยะ x เท่ากับ 0 m อุณหภูมิ T_0 มีค่าเท่ากับ 339.1002 °C ที่ระยะ x เท่ากับ 2 m อุณหภูมิ T_1 มีค่าเท่ากับ 306.0204 °C ที่ระยะ x เท่ากับ 4 m อุณหภูมิ T_2 มีค่าเท่ากับ 294.1448 °C ที่ระยะ x เท่ากับ 60 m อุณหภูมิ T_3 มีค่าเท่ากับ 301.0981 °C ที่ระยะ x เท่ากับ 8 m อุณหภูมิ T_4 มีค่าเท่ากับ 328.2710 °C และ ที่ระยะ x เท่ากับ 10 m อุณหภูมิ T_5 มีค่าเท่ากับ 400 °C

9.3.2 ปัญหาของสมการเชิงอนุพันธ์ไม่เชิงเส้น

ตัวอย่างเช่นการถ่ายเทความร้อนของแท่งลวดที่มีการแผ่รังสี การเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของแท่งลวดที่สภาวะคงตัวได้เป็นสมการดังนี้

$$\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_\infty - T) + \sigma(T_\infty{}^4 - T^4) = 0$$

เมื่อ σ เป็นสัมประสิทธิ์การแผ่รังสี

เมื่อเขียนให้อยู่ในรูปของการประมาณค่าอุพันธ์ได้เป็นสมการดังต่อไปนี้สำหรับจุด i ดังสมการ (9.15)

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2} + h'(T_\infty - T_i) + \sigma(T_\infty{}^4 - T_i^4) = 0$$

$$T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1} + h'(T_\infty - T_i)\Delta x^2 + \sigma(T_\infty{}^4 - T_i^4)\Delta x^2 = 0$$

$$-T_{i+1} + (2 + h'\Delta x^2)T_i - T_{i+1} = h'T_\infty \Delta x^2 + \sigma(T_\infty{}^4 - T_i^4)\Delta x^2 \qquad (9.15)$$

เนื่องจากเป็นระบบสมการไม่เชิงเส้นดังนั้นจึงจำเป็นต้องจัดรูปใหม่ได้เป็นสมการ (9.16) แล้วใช้วิธีการของเกาส์-ไซเดล ในการแก้หาคำตอบ

$$T_i = \frac{T_{i-1} + T_{i-1} + h' T_\infty \Delta x^2 + \sigma(T_\infty{}^4 - T_i^4)\Delta x^2}{2 + h'\Delta x^2} \tag{9.16}$$

ตัวอย่างที่ 9.4 การกระจายตัวของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่ที่วางระหว่างผนังสองด้านที่มีอุณหภูมิต่างกันเมื่อพิจารณาการพาความร้อน การนำความร้อนและการแผ่รังสีสามารถเขียนดังสมการ (E9.4-1)

$$\frac{d^2T}{dx^2} + h'(T_\infty - T) + \sigma(T_\infty{}^4 - T^4) = 0 \tag{E9.4-1}$$

เมื่อ σ เป็นสัมประสิทธิ์การแผ่รังสีมีค่าเท่ากับ 2.7×10^{-9} K^{-3}m^{-2} ค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C เมื่อแท่งลวดยาว 10 m ที่ผนังด้านหนึ่ง ($x = 0$ m) พบว่าณหภูมิของผนังเป็น 300 °C และที่ผนังอีกด้าน ($x = 10$ m) อุณหภูมิของผนังเป็น 400 °C จงหาอุณหภูมิภายในแท่งขดลวดที่ระยะทางต่างๆ เมี่ระยะห่างระหว่างจุดเท่ากับ 2 m ด้วยระเบียบวิธีผลต่างจำกัด

วิธีทำ

จากสมการ (9.16)

$$T_i = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} + h' T_\infty \Delta x^2 + \sigma\left(T_\infty^4 - T_i^4\right)\Delta x^2}{2 + h' T_\infty \Delta x^2}$$

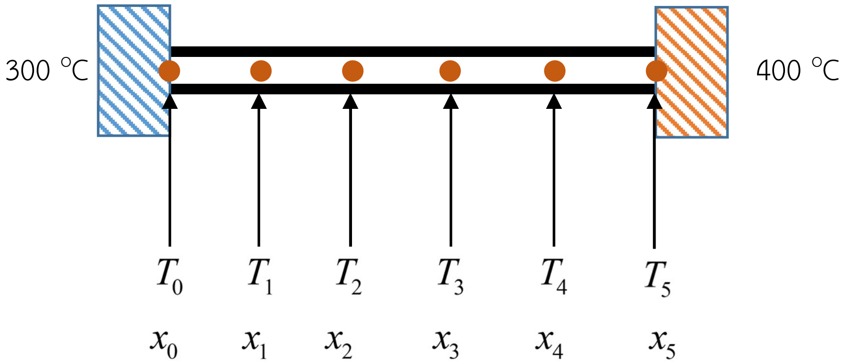
แทนค่าสัมประสิทธิ์การแผ่รังสีมีค่าเท่ากับ 2.7×10^{-9} K^{-3}m^{-2} ค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C

$$T_i = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} + 0.05(200)2^2 + 2.7\times10^{-9}\left(200^4 - T_i^4\right)2^2}{2 + 0.05(2)^2}$$

$$T_i = \frac{T_{i-1} + T_{i+1} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_i^4\right)}{2.2}$$

แทนค่าค่าคงที่ของ h' เท่ากับ 0.05 m^{-2} และอุณหภูมิอากาศ (T_∞) เท่ากับ 200 °C เมื่อ Δx เท่ากับ 2 m เมื่อ $T(0)$ และ $T(10)$ เท่ากับ 300 และ 400 °C ตามลำดับ กำหนดให้ระยะ x_0 เท่ากับ 0 m มีอุณหภูมิเป็น T_0 เท่ากับ 300 °C ระยะ x_1 เท่ากับ 2 m มีอุณหภูมิเป็น T_1 °C, ระยะ x_2 เท่ากับ 4 m มีอุณหภูมิเป็น T_2 °C, ระยะ x_3 เท่ากับ 6 m มีอุณหภูมิเป็น T_3 °C, ระยะ x_4 เท่ากับ 8 m มีอุณหภูมิเป็น T_4 °C และระยะ x_5 เท่ากับ 10 m มีอุณหภูมิเป็น T_5 ซึ่งมีค่าเท่ากับ 400 °C ดังรูปที่ E9.4-1 และใช้วิธีการทำซ้ำของเกาส์-ไซเดลในการหาผลเฉลย

$T_\infty = 200^o C$



รูปที่ E9.4-1 รูปประกอบตัวอย่างที่ 9.4

ที่มา: Chapra (2010)

ในการคำนวณรอบที่ 1 เมื่อ $T_{1,0} = T_{2,0} = T_{3,0} = T_{4,0} = 0$ °C

$$T_{1,1} = \frac{T_0 + T_{2,0} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{1,0}^4\right)}{2.2} = \frac{300 + 0 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 0^4\right)}{2.2} = 162.4°C$$

$$T_{2,1} = \frac{T_{1,1} + T_{3,0} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{2,0}^4\right)}{2.2} = \frac{159.24 + 0 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 0^4\right)}{2.2} = 99.85°C$$

$$T_{3,1} = \frac{T_{2,1} + T_{4,0} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{3,0}^4\right)}{2.2} = \frac{97.97 + 0 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 0^4\right)}{2.2} = 71.42°C$$

$$T_{4,1} = \frac{T_{3,1} + T_5 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{4,0}^4\right)}{2.2} = \frac{70.45 + 400 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 0^4\right)}{2.2} = 240.32°C$$

ในการคำนวณรอบที่ 2 เมื่อ $T_{1,1} = 162.4$ °C $T_{2,1} = 99.85$ °C $T_{3,1} = 71.42$ °C และ $T_{4,1} = 240.32$ °C

$$T_{1,2} = \frac{T_0 + T_{2,1} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{1,1}^4\right)}{2.2} = \frac{300 + 99.85 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 162.4^4\right)}{2.2} = 204.32°C$$

$$T_{2,2} = \frac{T_{1,2} + T_{3,1} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{2,1}^4\right)}{2.2} = \frac{204.37 + 71.42 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 99.85^4\right)}{2.2} = 150.91°C$$

$$T_{3,2} = \frac{T_{2,2} + T_{4,1} + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{3,1}^4\right)}{2.2} = \frac{150.91 + 240.32 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 71.42^4\right)}{2.2} = 203.74°C$$

$$T_{4,2} = \frac{T_{3,2} + T_5 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - T_{4,1}^4\right)}{2.2} = \frac{203.74 + 400 + 40 + 10.8\times10^{-9}\left(200^4 - 240.32^4\right)}{2.2} = 284.08°C$$

สำหรับการคำนวณในรอบถัดไปแสดงผลการคำนวณดังตารางที่ E9.4-1 จากตารางที่ E9.4-1 พบว่าในการคำนวณรอบที่ 8 พบว่าการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิมีค่าน้อยมากจนหยุดการคำนวณได้ ซึ่งจะได้ค่าของอุณหภูมิ $T_1 = 254.85$ °C $T_2 = 238.16$ °C $T_3 = 246.48$ °C และ $T_4 = 286.72$ °C

ตารางที่ E9.4-1 ตารางแสดงผลการคำนวณด้วยระเบียบวิธีของ Gauss-Seidel ทศนิยม 2 ตำแหน่ง

รอบที่	$T_{1,i}$	$T_{2,i}$	$T_{3,i}$	$T_{4,i}$
1	162.40	99.85	71.42	240.32
2	204.37	150.91	203.74	284.08
3	228.44	219.94	246.68	288.00
4	250.88	240.71	248.18	286.89
5	255.33	238.42	246.19	286.50
6	254.91	237.95	246.38	286.77
7	254.82	238.12	246.53	286.71
8	254.85	238.16	246.48	286.72

9.4 การแก้ปัญหาสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยด้วยวิธีผลต่างจำกัด

สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยเชิงเส้นตรงอันดับสอง (linear, second-order partial differential equation) สามารถเขียนในรูปแบบสมการทั่วไปได้ดังนี้

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+D=0$$

เมื่อ A B และ C เป็นฟังก์ชันของ x และ y D เป็นฟังก์ชันของ $x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}$

สำหรับปัญหาที่เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยเชิงเส้นตรงอันดับสองสามารถแบ่งได้ 3 กรณี ดังนี้

กรณีที่ 1 $B^2-4AC<0$ เป็นสมการเอลิปติก (Elliptic equation) ตัวอย่างสมการคือ $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial x\partial y}=0$

กรณีที่ 2 $B^2-4AC=0$ เป็นสมการพาราโบลิก (Parabolic equation) ตัวอย่างสมการคือ $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial x\partial y}=0$

กรณีที่ 3 $B^2-4AC>0$ เป็นสมการ Hyperbolic ตัวอย่างสมการคือ $\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}+\frac{1}{\lambda^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$

ตัวอย่างปัญหาที่เป็นสมการเอลิปติก เช่น การถ่ายเทความร้อนในแนวแกน x และ แกน y ซึ่งมีสมการดังสมการ (9.17)

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=0 \tag{9.17}$$

เมื่อใช้วิธีผลต่างจำกัดด้วยการประมาณค่าอนุพันธ์ดังนี้

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta x^2}$$

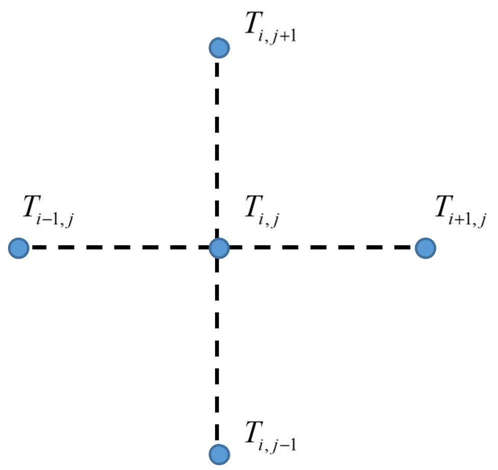
$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=\frac{T_{i,1+j}-2T_{i,j}+T_{i,1-j}}{\Delta y^2}$$

เมื่อแทนค่าการประมาณค่าอนุพันธ์ลงในสมมาร (9.17) ได้เป็นสมการ (9.18)

$$\frac{T_{i+1,j}-2T_{i,j}+T_{i-1,j}}{\Delta x^2}+\frac{T_{i,1+j}-2T_{i,j}+T_{i,1-j}}{\Delta y^2}=0 \qquad (9.18)$$

ถ้ากำหนดให้ $\Delta x=\Delta y$ ดังนั้นสมการ (9.18) ได้เป็นสมการ (9.19)

$$T_{i-1,j}+T_{i+1,j}+T_{i,j-1}+T_{i,j+1}-4T_{i,j}=0 \qquad (9.19)$$



รูปที่ 9.3 การกำหนดจุดในการคำนวณสำหรับการถ่ายเทความร้อนในแนวแกน x และ แกน y
ที่มา: Chapra (2010)

ดังนั้นสมการ (9.19) จัดรูปเพื่อหาคำตอบด้วยวิธีการของเลียบมันน์ (Liebmann Method) ซึ่งมีรูปแบบวิธีการแก้การคำตอบเช่นเดียวกับวิธีการทำซ้ำของเกาส์-ไซเดลได้เป็นสมการ (9.20)

$$T_{i,j}=\frac{T_{i+1,j}+T_{i-1,j}+T_{i,j+1}+T_{i,j-1}}{4} \qquad (9.20)$$

หรือเขียนระบบสมการให้อยู่ในรูปเมทริกต์แล้วแก้หาคำตอบด้วยวิธีการทางเมทริกต์

ตัวอย่างที่ 9.5 แผ่นเหล็กรูปร่างสี่เหลี่ยมจตุรัสขนาดกว้าง 10 cm และยาว 10 cm วางไว้ระหว่างกำแพง ซึ่งแต่ละกำแพงมีอุณหภูมิต่างกัน ดังรูป E9.5-1 การกระจายตัวของอุณหภูมิบนแผ่นเหล็กในแนวแกน x และแกน y สามารถใช้สมการ (E9.5-1) ในการอธิบายการกระจายตัวของอุณหภูมิที่จุด (x,y) ต่างๆ

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}=0 \qquad (E9.5\text{-}1)$$

จงหาการกระจายตัวของอุณหภูมิที่จุด (x,y) ต่างๆ เมื่อกำหนดให้ $\Delta x=\Delta y=2.5$ cm

วิธีทำ

จัดสมการ (E9.5-1) ได้เป็นสมการ (E9.5-2) ซึ่งเป็นวิธีผลต่างจำกัด

$$T_{i-1,j}+T_{i+1,j}+T_{i,j-1}+T_{i,j+1}-4T_{i,j}=0 \qquad (E9.5\text{-}2)$$

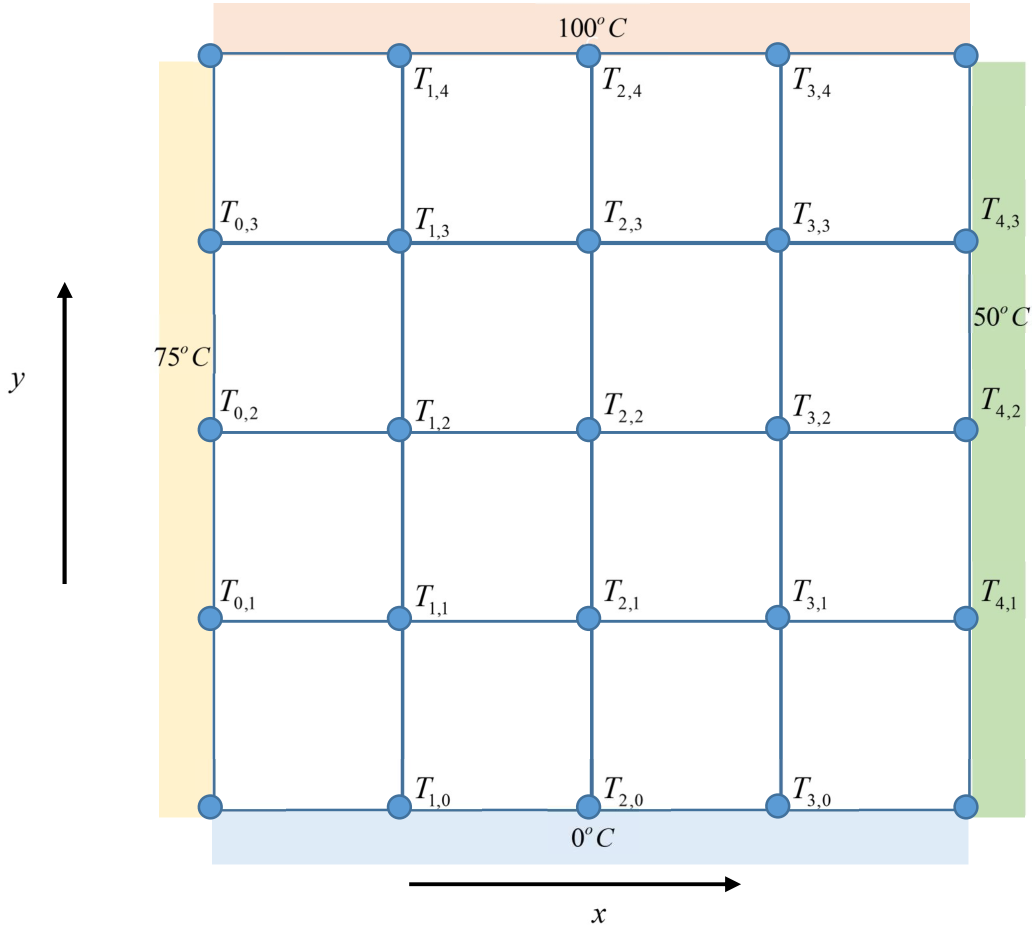
จากรูปที่ E9.5-1 เมื่อหาอุณหภูมิบนแผ่นเหล็กที่จุด (x,y) ต่างๆ ได้ดังนี้

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,1}$ จะได้ $T_{0,1}+T_{2,1}+T_{1,0}+T_{1,2}-4T_{1,1}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,1}$ จะได้ $T_{1,1}+T_{3,1}+T_{2,0}+T_{2,2}-4T_{2,1}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,1}$ จะได้ $T_{2,1}+T_{4,1}+T_{3,0}+T_{3,2}-4T_{3,1}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,2}$ จะได้ $T_{0,2}+T_{2,2}+T_{1,1}+T_{1,3}-4T_{1,2}=0$



รูปที่ E9.5-1 การกระจายของอุณหภูมิบนแผ่นเหล็กที่จุด (x,y) ต่างๆ

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,2}$ จะได้ $T_{1,2}+T_{3,2}+T_{2,1}+T_{2,3}-4T_{2,2}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,2}$ จะได้ $T_{2,2}+T_{4,2}+T_{3,1}+T_{3,3}-4T_{3,2}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,3}$ จะได้ $T_{0,3}+T_{2,3}+T_{1,2}+T_{1,4}-4T_{1,3}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,3}$ จะได้ $T_{1,3}+T_{3,3}+T_{2,2}+T_{2,4}-4T_{2,3}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,3}$ จะได้ $T_{2,3}+T_{4,3}+T_{3,2}+T_{3,4}-4T_{3,3}=0$

จากรูปที่ E9.5-1 เมื่ออุณหภูมิที่กำแพงเป็นดังนี้

$T_{0,1}=T_{0,2}=T_{0,3}=75\,^{\circ}\mathrm{C}$ $\qquad$ $T_{1,0}=T_{2,0}=T_{3,0}=0\,^{\circ}\mathrm{C}$

$T_{4,1}=T_{4,2}=T_{4,3}=50\,^{\circ}\mathrm{C}$ $\qquad$ $T_{1,4}=T_{2,4}=T_{3,4}=100\,^{\circ}\mathrm{C}$

ดังนั้นเมื่อแทนค่าอุณหภูมิที่กำแพงลงในสมการได้เป็นดังนี้

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,1}$ จะได้ $0+T_{2,1}+75+T_{1,2}-4T_{1,1}=0$ หรือ $4T_{1,1}-T_{1,2}-T_{2,1}=75$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,1}$ จะได้ $T_{1,1}+T_{3,1}+0+T_{2,2}-4T_{2,1}=0$ หรือ $-T_{1,1}+4T_{2,1}-T_{3,1}-T_{2,2}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,1}$ จะได้ $T_{2,1}+50+0+T_{3,2}-4T_{3,1}=0$ หรือ $-T_{2,1}+4T_{3,1}-T_{3,2}=50$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,2}$ จะได้ $75+T_{2,2}+T_{1,1}+T_{1,3}-4T_{1,2}=0$ หรือ $-T_{1,1}+4T_{1,2}-T_{1,3}-T_{2,2}=75$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,2}$ จะได้ $T_{1,2}+T_{3,2}+T_{2,1}+T_{2,3}-4T_{2,2}=0$ หรือ $-T_{1,2}-T_{2,1}+4T_{2,2}-T_{2,3}-T_{3,2}=0$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,2}$ จะได้ $T_{2,2}+50+T_{3,1}+T_{3,3}-4T_{3,2}=0$ หรือ $-T_{2,2}-T_{3,1}+4T_{3,2}-T_{3,3}=50$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{1,3}$ จะได้ $75+T_{2,3}+T_{1,2}+100-4T_{1,3}=0$ หรือ $-T_{1,2}+4T_{1,3}-T_{2,3}=175$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{2,3}$ จะได้ $T_{1,3}+T_{3,3}+T_{2,2}+100-4T_{2,3}=0$ หรือ $-T_{1,3}-T_{2,2}+4T_{2,3}-T_{3,3}=100$

เมื่อพิจารณาที่ $T_{3,3}$ จะได้ $T_{2,3}+50+T_{3,2}+100-4T_{3,3}=0$ หรือ $-T_{2,3}-T_{3,2}+4T_{3,3}=150$

สำหรับวิธีการหาคำตอบของอุณหภูมิที่จุด (x,y) ต่างๆ ด้วยวิธีทางเมทริกต์

แก้สมการโดยการคูณด้วยเมทริกต์ผกผัน ดัง $[A]^{-1}[A][x]=[A]^{-1}[B]$

ดังนั้นเมื่อนำสมการทั้งหมดมาเขียนให้อยู่ในรูปเมทริกต์สามารถขียนได้ดังนี้

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{1,1} \\ T_{2,1} \\ T_{3,1} \\ T_{1,2} \\ T_{2,2} \\ T_{3,2} \\ T_{1,3} \\ T_{2,3} \\ T_{3,3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 75 \\ 0 \\ 50 \\ 75 \\ 0 \\ 50 \\ 175 \\ 100 \\ 150 \end{bmatrix}$$

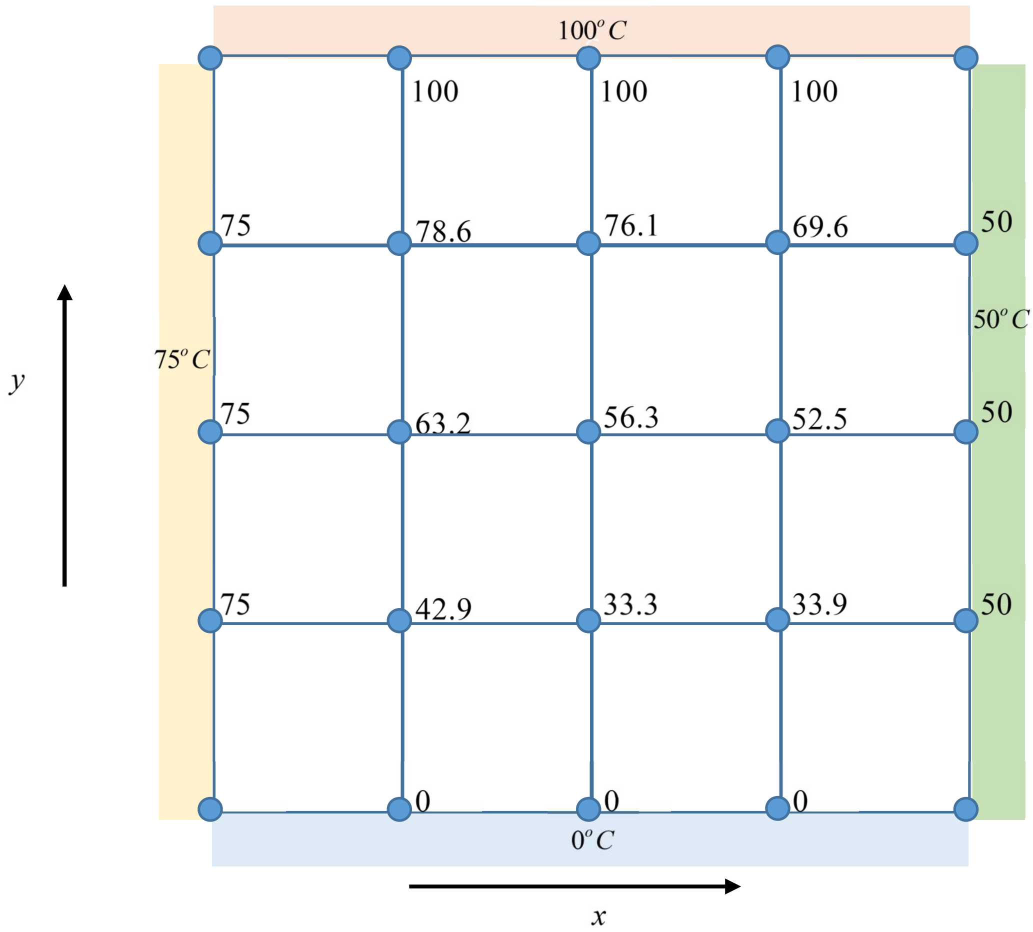
สำหรับเมทริกต์ผกผัน คือ

$$[A]^{-1} = \begin{bmatrix} 0.30 & 0.10 & 0.03 & 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.03 & 0.03 & 0.01 \\ 0.10 & 0.33 & 0.10 & 0.06 & 013 & 0.06 & 0.03 & 0.04 & 0.03 \\ 0.03 & 0.10 & 0.30 & 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.01 & 0.03 & 0.03 \\ 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.33 & 0.13 & 0.04 & 0.10 & 0.06 & 0.03 \\ 0.06 & 0.13 & 0.06 & 0.13 & 0.38 & 0.13 & 0.06 & 0.13 & 0.06 \\ 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.04 & 0.13 & 0.33 & 0.03 & 0.06 & 0.10 \\ 0.03 & 0.03 & 0.01 & 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.30 & 0.10 & 0.03 \\ 0.03 & 0.04 & 0.03 & 0.06 & 0.13 & 0.06 & 0.10 & 0.33 & 0.10 \\ 0.01 & 0.03 & 0.03 & 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.03 & 0.10 & 0.30 \end{bmatrix}$$

$$[A]^{-1}[B]=\begin{bmatrix} 0.30 & 0.10 & 0.03 & 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.03 & 0.03 & 0.01 \\ 0.10 & 0.33 & 0.10 & 0.06 & 013 & 0.06 & 0.03 & 0.04 & 0.03 \\ 0.03 & 0.10 & 0.30 & 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.01 & 0.03 & 0.03 \\ 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.33 & 0.13 & 0.04 & 0.10 & 0.06 & 0.03 \\ 0.06 & 0.13 & 0.06 & 0.13 & 0.38 & 0.13 & 0.06 & 0.13 & 0.06 \\ 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.04 & 0.13 & 0.33 & 0.03 & 0.06 & 0.10 \\ 0.03 & 0.03 & 0.01 & 0.10 & 0.06 & 0.03 & 0.30 & 0.10 & 0.03 \\ 0.03 & 0.04 & 0.03 & 0.06 & 0.13 & 0.06 & 0.10 & 0.33 & 0.10 \\ 0.01 & 0.03 & 0.03 & 0.03 & 0.06 & 0.10 & 0.03 & 0.10 & 0.30 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 75 \\ 0 \\ 50 \\ 75 \\ 0 \\ 50 \\ 175 \\ 100 \\ 150 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 42.9 \\ 33.3 \\ 33.9 \\ 63.2 \\ 56.3 \\ 52.5 \\ 78.6 \\ 76.1 \\ 69.6 \end{bmatrix}$$

$$[A]^{-1}[A][x]=\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} T_{1,1} \\ T_{2,1} \\ T_{3,1} \\ T_{1,2} \\ T_{2,2} \\ T_{3,2} \\ T_{1,3} \\ T_{2,3} \\ T_{3,3} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 42.9 \\ 33.3 \\ 33.9 \\ 63.2 \\ 56.3 \\ 52.5 \\ 78.6 \\ 76.1 \\ 69.6 \end{bmatrix}$$

อุณหภูมิที่จุด (x,y) ต่างๆ ด้วยวิธีทางเมทริกต์ดังรูปที่ E9.5-2

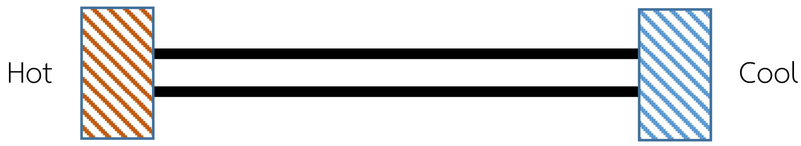


รูปที่ E9.5-2 การกระจายของอุณหภูมิบนแผ่นเหล็กที่จุด (x,y) ต่างๆ ต่างๆ ด้วยวิธีทางเมทริกต์ดังรูปที่

ตัวอย่างที่ 9.6 แท่งลวดนำความร้อนที่วางไว้ระหว่างผนังที่มีอุณหภูมิต่างกัน ดังรูปที่ E9.6-1 พบว่าการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิที่เวลาต่างๆ ภายในแท่งลวดนำความร้อนในแนวแกน x เป็นไปตามสมการ (E9.6-1)

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \tag{E9.6-1}$$

เมื่อ T คืออุณหภูมิในแท่งลวด (°C) x คือตำแหน่งบนแท่งลวด (cm) ρ คือค่าความหนาแน่นของแท่งลวด (g/cm^3) C_p คือค่าความจุความร้อนของแท่งลวด (cal/g-°C) k คือค่าการนำความร้อนของแท่งลวด (cal/s-cm-°C) จงหาการกระจายของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่มีความยาว 10 cm เมื่อความหนาแน่นของแท่งลวดเท่ากับ 2.7 g/cm^3 ความจุความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.2174 Cal/g-°C และ ค่าการนำความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.49 cal/s-cm-°C) ถ้าระยะห่างของตำแหน่งบนแท่งลวด (Δx) เป็น 2 cm และระยะห่างของเวลา (Δt) เป็น 0.1 s สำหรับค่าขอบเขตดังนี้ เมื่อเวลาเริ่มต้นอุณหภูมิทุกจุดภายในแท่งลวดนำความร้อนเท่ากับ 0 °C และผนังด้านร้อน ($x = 0$ m) และผนังด้านเย็น ($x = 10$ m) ไม่มีการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิของผนังและมีค่าเท่ากับ 100 และ 50 °C ตามลำดับ



รูปที่ E9.6-1 ปัญหาการนำความร้อนภายในแท่งลวดนำความร้อน
ที่มา: Chapra (2010)

วิธีทำ

จากสมการ (E9.6-1) เปลี่ยนให้อยู่ในรูปผลต่างจำกัดเมื่อแทนด้วยค่าอนุพันธ์แบบตรงกลางจะได้เป็นสมการ (E9.6-2)

สำหรับการเปลี่ยนแปลงของเวลา $\dfrac{\partial T}{\partial t} = \dfrac{T_i^{i+1} - T_i^i}{\Delta t}$

สำหรับการเปลี่ยนแปลงตำแหน่ง $\dfrac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \dfrac{T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i}{\Delta x^2}$

$$\rho C_p \left(\frac{T_i^{i+1} - T_i^i}{\Delta t} \right) = k \left(\frac{T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i}{\Delta x^2} \right)$$

$$T_i^{i+1} - T_i^i = \frac{k \Delta t}{\rho C_p \Delta x^2} \left(T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i \right)$$

$$T_i^{i+1} = T_i^i + \frac{k \Delta t}{\rho C_p \Delta x^2} \left(T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i \right) = T_i^i + \lambda \left(T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i \right) \qquad \text{(E9.6-2)}$$

เมื่อ $\lambda = \dfrac{k \Delta t}{\rho C_p \Delta x^2}$ และแทนค่า ความหนาแน่นของแท่งลวดเท่ากับ 2.7 g/cm^3 ความจุความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.2174 Cal/g-°C ค่าการนำความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.49 cal/s-cm-°C) ระยะห่างของตำแหน่งบนแท่งลวด (Δx) เป็น 2 cm และระยะห่างของเวลา (Δt) เป็น 0.1 s

$$\lambda = \frac{k \Delta t}{\rho C_p \Delta x^2} = \frac{0.49(0.1)}{2.7(0.2174)(2^2)} = 0.02088$$

เมื่อแทนค่า λ ลงในสมการ (E9.6-2) ได้เป็นสมการ (E9.6-3)

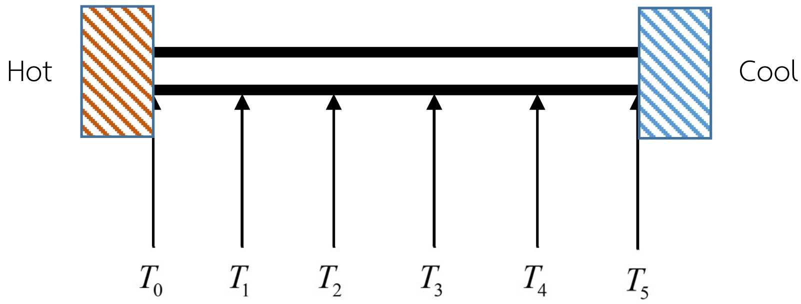
$$T_i^{i+1} = T_i^i + 0.02088 \left(T_{i+1}^i - 2T_i^i + T_{i-1}^i \right) \qquad \text{(E9.6-3)}$$

จากรูปที่ E9.6-2 เป็นการแสดงตำแหน่งต่างๆ บนแท่งลวดนำความร้อน ซึ่งจะได้ตำแหน่งที่ยังไม่ทราบว่าอุณหภูมิ 4 ตำแหน่ง คือ T_1 T_2 T_3 และ T_4 ส่วน T_0 และ T_5 มีอุณหภูมิเท่ากับ 100 และ 50 °C ตามลำดับ ดังนั้นสามารถสร้างสมการของอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ บนลวดนำความร้อนได้ 4 สมการ โดยอาศัยสมการ (E9.6-3) เมื่ออุณหภูมิที่ผนังทั้งสองด้านไม่เปลี่ยนแปลงตามเวลา จะได้สมการดังนี้

$$T_1^{i+1} = T_1^i + 0.02088 \left(T_2^i - 2T_1^i + T_0^i \right) = T_1^i + 0.02088 \left(T_2^i - 2T_1^i + 100 \right)$$

$$T_2^{i+1} = T_2^i + 0.02088 \left(T_3^i - 2T_2^i + T_1^i \right)$$

$$T_3^{i+1} = T_3^i + 0.02088\left(T_4^i - 2T_3^i + T_2^i\right)$$
$$T_4^{i+1} = T_4^i + 0.02088\left(T_5^i - 2T_4^i + T_3^i\right) = T_4^i + 0.02088\left(50 - 2T_4^i + T_3^i\right)$$



รูปที่ E9.6-2 การหาอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ ในแท่งลวดนำความร้อน

ที่มา: Chapra (2010)

รอบการคำนวณที่ 1 เมื่อ $t_0 = 0\,\text{s}$ อุณหภูมิของ $T_1^0 = T_2^0 = T_3^0 = T_4^0 = 0$ °C

$t_1 = t_0 + \Delta t = 0 + 0.1 = 0.1\,\text{s}$

$T_1^1 = T_1^0 + 0.02088\left(T_2^0 - 2T_1^0 + 100\right) = 0 + 0.02088\left(0 - 2x0 + 100\right) = 2.088$ °C

$T_2^1 = T_2^0 + 0.02088\left(T_3^0 - 2T_2^0 + T_1^0\right) = 0 + 0.02088\left(0 - 2x0 + 0\right) = 0$ °C

$T_3^1 = T_3^0 + 0.02088\left(T_4^0 - 2T_3^0 + T_2^0\right) = 0 + 0.02088\left(0 - 2x0 + 0\right) = 0$ °C

$T_4^1 = T_4^0 + 0.02088\left(T_5^0 - 2T_4^0 + T_3^0\right) = 0 + 0.02088\left(50 - 2x0 + 0\right) = 1.0440$ °C

รอบการคำนวณที่ 2 เมื่อ $t_1 = 0.1\,\text{s}$ อุณหภูมิของ $T_1^1 = 2.088$ °C $T_2^1 = T_3^1 = 0$ °C $T_4^1 = 1.0440$ °C

$T_1^2 = T_1^1 + 0.02088\left(T_2^1 - 2T_1^1 + 100\right) = 2.0880 + 0.02088\left(0 - 2x2.0880 + 100\right) = 4.0878$ °C

$T_2^2 = T_2^1 + 0.02088\left(T_3^1 - 2T_2^1 + T_1^1\right) = 0 + 0.02088\left(0 - 2x0 + 2.088\right) = 0.0436$ °C

$T_3^2 = T_3^1 + 0.02088\left(T_4^1 - 2T_3^1 + T_2^1\right) = 0 + 0.02088\left(1.044 - 2x0 + 0\right) = 0.0218$ °C

$T_4^2 = T_4^1 + 0.02088\left(50 - 2T_4^1 + T_3^1\right) = 0 + 0.02088\left(50 - 2x1.044 + 0\right) = 2.0444$ °C

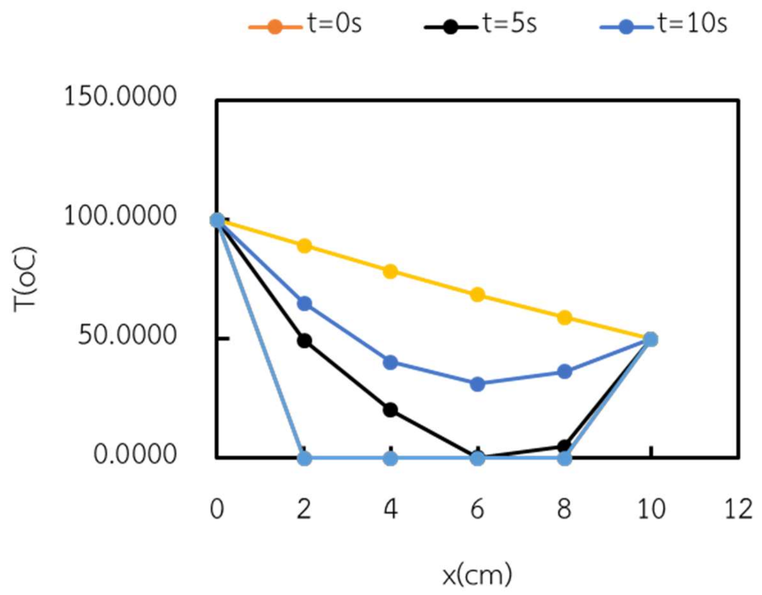
สำหรับผลการคำนวณที่รอบต่างๆ แสดงดังตารางที่ E9.6-1 จากตารางที่ E9.6-1 จะเห็นได้ว่าเมื่อรอบการคำนวณเพิ่มขึ้น ค่าของอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ จะมีค่าเพิ่มขึ้น จนเข้ามีค่าคงที่เมื่อทำการคำนวณถึงรอบที่ 1976 พบว่าค่าของอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ ดังแสดงในรูปที่ E9.6-3

t_i

ตารางที่ E9.6-1 ผลการคำนวณหาค่าอุณหภูมิ T_1^i T_2^i T_3^i และ T_4^i ที่รอบต่างๆ

รอบการคำนวณที่	t_i (s)	T_1^i (°C)	T_2^i (°C)	T_3^i (°C)	T_4^i (°C)
เริ่มต้น	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1	0.1000	2.0880	0.0000	0.0000	1.0440
2	0.2000	4.0888	0.0436	0.0218	2.0444

รอบการคำนวณที่	t_i (s)	T_1^i (°C)	T_2^i (°C)	T_3^i (°C)	T_4^i (°C)
3	0.3000	6.0070	0.1276	0.0645	3.0035
4	0.4000	7.8468	0.2490	0.1272	3.9234
5	0.5000	9.6123	0.4051	0.2090	4.8062
6	0.6000	11.3073	0.5933	0.3091	5.6539
7	0.7000	12.9355	0.8111	0.4266	6.4682
8	0.8000	14.5003	1.0562	0.5608	7.2510
9	0.9000	16.0048	1.3266	0.7108	8.0039
10	1.0000	17.4521	1.6202	0.8760	8.7285
20	2.0000	29.3409	5.4831	3.2074	14.7112
30	3.0000	37.8610	10.2445	6.3810	19.0995
40	4.0000	44.2749	15.2324	9.9813	22.5557
50	5.0000	49.3223	20.1203	13.7412	25.4533
100	10.0000	64.8566	40.1877	31.0510	36.2589
200	20.0000	79.0215	62.2745	52.3208	49.0964
300	30.0000	85.0856	72.0504	62.0529	55.0896
400	40.0000	87.7943	76.4312	66.4313	57.7945
500	50.0000	89.0097	78.3976	68.3976	59.0097
1796	179.6000	90.0000	80.0000	70.0000	60.0000



รูปที่ E9.6-3 ความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิที่ตำแหน่งต่างๆ กับเวลา

การกำหนดขนาดของ Δx และ Δt ในตัวอย่างที่ 9.6 ดังสมการ (9.20)

$$\frac{k\Delta t}{\rho C_p \Delta x^2} \le \lambda \tag{9.20}$$

เมื่อค่า $\lambda = \frac{1}{2}$ พบว่าคำตอบที่ได้มีการลู่เข้าหาคำตอบแต่คำตอบที่ได้ในระหว่างการคำนวณอาจเกิดการแกว่งได้ (oscillatation) ถ้า $\lambda = \frac{1}{4}$ พบว่าคำตอบที่ได้มีการลู่เข้าหาคำตอบและไม่เกิดการแกว่งในระหว่างการคำนวณ และถ้า $\lambda = \frac{1}{6}$ พบว่าคำตอบที่ได้มีการลู่เข้าหาคำตอบและไม่เกิดการแกว่งในระหว่างการคำนวณและความคลาดเคลื่อนจากการตัดเศษมีค่าต่ำสุด

จากตัวอย่างที่ 9.6 เมื่อ ค่าความหนาแน่นของแท่งลวดเท่ากับ 2.7 g/cm^3 ค่าความจุความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.2174 Cal/g-$^\circ$C ค่าการนำความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.49 cal/s-cm-$^\circ$C) ระยะห่างของตำแหน่งบนแท่งลวด (Δx) เป็น 2 cm และระยะห่างของเวลา (Δt) เป็น 1 sec สามารถคำนวณได้จากสมการ (9.20)

$$\frac{k\Delta t}{\rho C_p \Delta x^2} = \frac{0.49(1)}{2.7(0.2174)(2^2)} = 0.208$$

ซึ่งจะเห็นว่า λ ค่าที่คำนวณได้ต่ำกว่า $\frac{1}{6}$ แสดงว่าระยะห่างของตำแหน่ง (Δx) และระยะห่างของเวลา (Δt) เป็นค่าที่เหมาะสม

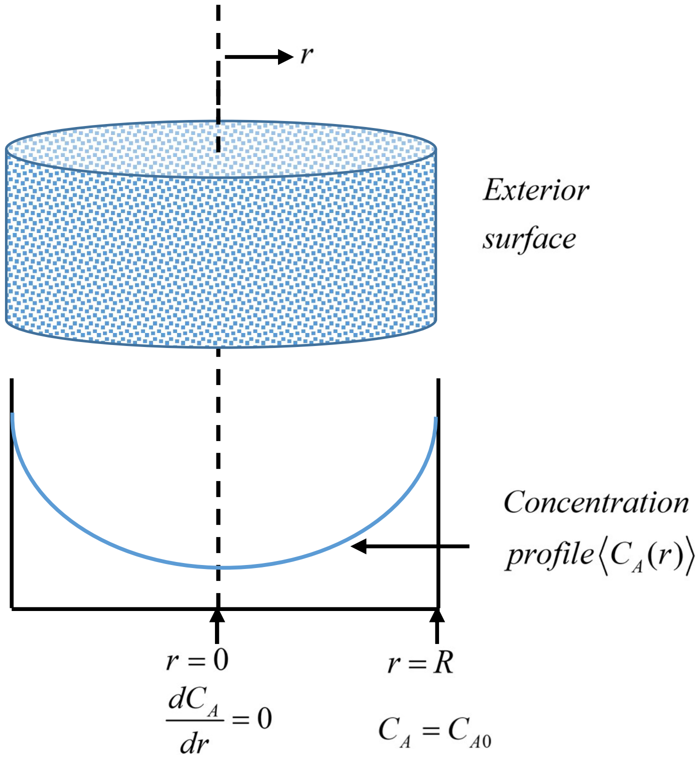
9.5 แบบฝึกหัด

HM9.1 ปฏิกิริยา A $\longrightarrow$ B ซึ่งเกิดปฏิกิริยาบนผิวตัวเร่งปฏิกิริยาพบว่าการเปลี่ยนเปลงความเข้มข้นของสารขึ้นกับอัตราเร็วในการแพร่และอัตราเร็วในการเกิดปฏิกิริยามีแบบจำลองดังสมการ (HM9.1-1)

$$D\frac{d^2C_A}{dr^2} - kC_A = 0 \qquad \text{(HM9.1-1)}$$

เมื่อ C_A คือความเข้มข้นของสาร A ที่ระยะรัศมี r เมื่อ D และ k เป็นค่าสัมประสิทธิ์การแพร่และค่าคงที่ปฏิกิริยา ตามลำดับ

จงหาเขียนกราฟความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของสาร A กับรัศมีของเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยาต่าง ๆ เมื่อรัศมีของเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ $2\text{x}10^{-3}$ cm ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่เท่ากับ 0.1 $\text{cm}^2\text{/s}$ และค่าคงที่ปฏิกิริยาเท่ากับ 0.1 $\text{cm}^3\text{/cm}^2$-cat-s เมื่อความเข้มข้นที่ผิวตัวเร่งปฏิกิริยาเท่ากับ 0.001 mol/dm^3 และที่จุดศูนย์กลางของเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยา อัตราการเปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของสาร A กับรัศมีเป็น 0 mol/L-cm

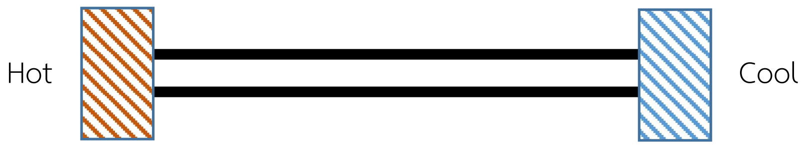


รูปที่ HM9.1-1 รูปแสดงความเข้มข้นของสาร A ที่ระยะรัศมีของเม็ดตัวเร่งปฏิกิริยาต่างๆ

HM9.2 แท่งลวดนำความร้อนที่วางไว้ระหว่างผนังที่มีอุณหภูมิต่างกัน ดังรูปที่ HM9.2-1 พบว่าการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิที่เวลาต่างๆ ภายในแท่งลวดนำความร้อนในแนวแกน x เป็นไปตามสมการ (HM9.2-1)

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \qquad \text{(HM9.2-1)}$$

เมื่อ T คืออุณหภูมิในแท่งลวด (°C) x คือตำแหน่งบนแท่งลวด (cm) ρ คือค่าความหนาแน่นของแท่งลวด (g/cm^3) C_p คือค่าความจุความร้อนของแท่งลวด (cal/g-°C) k คือค่าการนำความร้อนของแท่งลวด (cal/s-cm-°C) จงหาการกระจายของอุณหภูมิภายในแท่งลวดที่มีความยาว 10 cm เมื่อความหนาแน่นของแท่งลวดเท่ากับ 2.7 g/cm^3 ความจุความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.2174 Cal/g-°C และ ค่าการนำความร้อนของแท่งลวดเท่ากับ 0.49 cal/s-cm-°C) ถ้าระยะห่างของตำแหน่งบนแท่งลวด (Δx) เป็น 1 cm และระยะห่างของเวลา (Δt) เป็น 0.1 s เมื่อเวลาเริ่มต้นอุณหภูมิทุกจุดภายในแท่งลวดนำความร้อนเท่ากับ 25 °C และผนังด้านร้อน ($x = 0$ m) อุณหภูมิของผนังและมีค่าเท่ากับ 300 °C และผนังด้านเย็น ($x = 10$ m) พบว่าอัตราการถ่ายเทความร้อนมีค่าเท่ากับ 0 ($\frac{\partial T}{\partial x} = 0$)



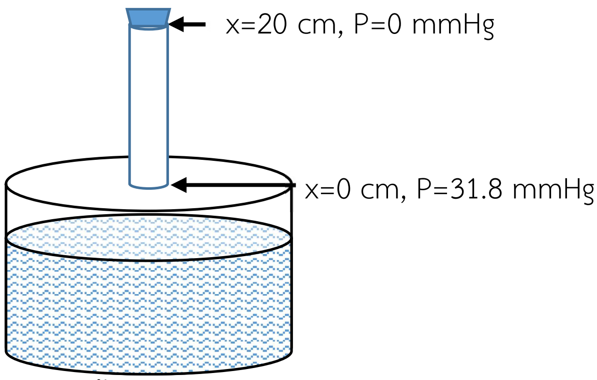
รูปที่ HM9.2-1 การนำความร้อนภายในแท่งลวดนำความร้อน

HM9.3 ขวดบรรจุน้ำเต็มที่ต่อกับจุกท่อที่มีความยาว 20 cm โดยปลายท่อเปิดจุกแน่น ดังรูปที่ HM9.3-1 ถ้าเปิดจุกจะทำให้น้ำเกิดการระเหยออกจากขวดไปยังอากาศ การแพร่ของไอน้ำจากผิวน้ำภายในขวดผ่านท่อไปยังอากาศ สามารถเขียนเป็นสมการ (HM9.3-1) เพื่อแสดงอัตราการเปลี่ยนแปลงความดันไอของน้ำภายในท่อที่เวลาต่างๆ

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\frac{d^2P}{dx^2} \qquad \text{(HM9.3-1)}$$

เมื่อ P คือความดันไอของน้ำที่ระยะ x และ t คือเวลา เมื่อ D คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ซึ่งมีค่าเท่ากับ 0.115 cm^2/s และพบว่าความดันไออิ่มตัวของน้ำมีค่าเท่ากับ 31.8 mmHg จงหาการกระจายของความดันไอของน้ำที่ระยะทางต่างๆ ที่สมดุล โดยก่อนปิดจุก ความดันไอน้ำภายในท่อมีค่าเท่ากับ 31.8 mmHg และความดันไอน้ำที่ปลายท่อมีค่าเท่ากับ 0 mmHg (ระยะ x เท่ากับ 20 cm) ตลอดเวลา ถ้ากำหนดให้ $\Delta x = 4$ cm และ

$$\Delta t = \frac{\Delta x^2}{D} = \frac{4^2}{0.115} = 139.1\,\text{sec}$$



รูปที่ HM9.3-1 ขวดบรรจุน้ำเต็มที่ต่อกับจุกท่อที่มีความยาว 20 cm โดยปลายท่อเปิดจุกแน่น

9.6 บรรณานุกรม

1. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

2. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

3. E. Joseph Billo, Excel@ for Scientists and Engineers Numerical Methods, John Wiley & Sons, 2007

แผนการสอน สัปดาห์ที่ 15

หัวข้อการสอน

การนำเสนอในหัวข้อการประยุกต์ใช้วิธีการแก้ปัญหาในวิชาต่างๆ ที่ได้เรียนไป/กรณีศึกษา

ผู้สอน

ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. สิทธินันท์ ท่อแก้ว

วัตถุประสงค์

1. เพื่อให้นิสิตนำความรู้ที่ได้เรียนมาประยุกต์ในวิชา วศค316 จลนพลศาสตร์วิศวกรรมเคมีและการออกแบบเครื่องปฏิกรณ์

2. เพื่อให้นิสิตเข้าใจการทำงานเป็นกลุ่ม การนำเสนอ

3. เพื่อให้นิสิตประยุกต์ excel มาช่วยในการคำนวณ

เนื้อหา

1 การนำเสนอรายงาน

การจัดประสบการณ์การเรียนรู้

1. บอกวัตถุประสงค์และอธิบายเนื้อหาในชั่วโมง	10 นาที
2. นำเสนอรายงาน	90 นาที
3. กิจกรรมกลุ่ม ซักถาม	80 นาที

สื่อการสอน

1. เอกสารคำสอนวิชา วศค 371 คณิตศาสตร์ประยุกต์สำหรับวิศวกรเคมี

2. เอกสารนำเสนอ Power Point

3. Visualizer Ipad คอมพิวเตอร์และเครื่องฉาย LCD

4. Web-based instruction

การวัดผลและประเมินผล

วัดความรู้ ความเข้าใจเนื้อหาด้วยวิธีการถามตอบ เพื่อให้นิสิตได้มีการแลกเปลี่ยนความคิด การประยุกต์.ใช้ excel สำหรับการแก้ปัญหา และมีการสอบวัดผล

บรรณานุกรม

1. สุริยา พันธ์โกศล และ คณิต กฤษณังกูร, การทำนายความหนืดจลน์ของไบโอดีเซลที่อุณหภูมิต่างๆ จากค่าสะปอนนิฟิเคชันและค่าไอโอดีน, วารสารวิจัยและพัฒนา มจธ. ปีที่ 39 ฉบับที่ 2 เมษายน - มิถุนายน 2559

2. E. Joseph Billo, Excel@ for Scientists and Engineers Numerical Methods, John Wiley & Sons, 2007

3. H. Scott Fogler, Elements of chemical reaction engineering (Fifth Edition), Pearson College, 2016

4. Kenneth A. Solen and John N. Harb, Introduction to Chemical Engineering: Tools for Today and Tomorrow (Fifth edition), John Wiley & Sons Inc, 2010

5. Lazarus Godson Asirvatham, Nandigana Vishal, Senthil Kumar Gangatharan and Dhasan Mohan Lal, Experimental Study on Forced Convective Heat Transfer with Low Volume Fraction of CuO/Water Nanofluid, Energies 2009, 2, 97-119

6. R. Byron Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot, Transport phenomena (Second Edition), J. Wiley, 2002

7. Steven C. Chapra, Numerical Methods for Engineers (Sixth Edition), McGraw-Hill Education 2010

8. Steven C. Chapra, Applied Numerical Methods with MATLAB® for Engineers and Scientists (Third Edition), McGraw-Hill Education 2012

9. Ward Cheney and David Kincaid, Numerical Mathematics and Computing (Sixth edition), Thomson Higher Education, 2008

10. http://pioneer.netserv.chula.ac.th/~ltachai/210/lecture_notes/ch08.pdf

11. https://www.eng.auburn.edu/~clemept/CEANALYSIS_FALL2011/Week1/non_Linearregressio n_paper.pdf

ภาคผนวก

1.