

บทที่ 2

เอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

การศึกษาการปรับปรุงประสิทธิภาพวิธีรุงง-คุดตา สำหรับการแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญในสมการแบบอันดับผสม ในครั้งนี้ผู้วิจัยได้รวบรวมเอกสารและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับวิธีรุงง-คุดตา และปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ ดังนี้

1. ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ
2. วิธีรุงง-คุดตา แบบไม่ชัดเจนแนวเดียว
3. เอกสารและบทความที่เกี่ยวข้อง

ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญ

อำพล ธรรมเจริญ (2532) ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่ใช้แก้ปัญหาค่าขอบมีหลายวิธี แต่ละวิธีมีข้อดีข้อเสียแตกต่างกัน เช่น วิธีผลต่างจำกัด วิธีฟังก์ชันประมาณค่า และวิธียิงเป้า

วิธีผลต่างจำกัด (Finite Difference Method) มีวิธีการและแนวคิดดังนี้ คือ แบ่งช่วงที่จะหาผลเฉลยเป็น n ช่วงเท่า ๆ กัน ด้วยจุด $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ (แต่ละช่วงมีความกว้างเท่ากับ h) แล้วแทนค่าอนุพันธ์ที่จุดต่าง ๆ ด้วยค่าประมาณในรูปสมการผลต่าง ผลที่ได้คือ สมการผลต่างซึ่งจะเป็นระบบสมการพีชคณิต เมื่อหาผลเฉลยของระบบสมการนี้ได้ ก็จะได้ผลเฉลยโดยประมาณของปัญหาค่าขอบตามต้องการ ในการประมาณค่าอนุพันธ์เรามักใช้สูตรผลต่างส่วนกลางและสูตรสี่เหลี่ยมคางหมู ซึ่งเป็นวิธีการอันดับสอง

สำหรับวิธีผลต่างจำกัดสามารถใช้ได้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์เป็นแบบเชิงเส้น แม้จะสามารถใช้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์ที่ไม่เป็นเชิงเส้นได้ แต่ก็มีปัญหายากในการแก้สมการพีชคณิตขนาดใหญ่ที่ไม่เป็นแบบเชิงเส้น และสำหรับสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีอันดับสูง (สูงกว่ากำลังสอง) หรือระบบสมการเชิงอนุพันธ์ขนาดใหญ่ ความยุ่งยากในการแก้ระบบสมการพีชคณิตก็เพิ่มขึ้นหลายเท่า ค่าคลาดเคลื่อนจากวิธีนี้โดยปกติมีค่าสูง

วิธีฟังก์ชันประมาณค่า (Collocation Method) มีแนวคิด คือ เราจะประมาณค่าของผลเฉลยด้วยฟังก์ชันที่เหมาะสมตลอดช่วงที่จะหาผลเฉลย ฟังก์ชันที่ประมาณค่าผลเฉลยต้องสอดคล้องกับสมการเชิงเส้นที่บางจุดและสอดคล้องกับเงื่อนไขค่าขอบด้วย

สำหรับวิธีฟังก์ชันประมาณค่า มักจะใช้กับปัญหาที่มีสมการเชิงอนุพันธ์เป็นแบบเชิงเส้น ค่าความคลาดเคลื่อนมักจะมีสูงเพราะมีข้อจำกัดเกี่ยวกับฟังก์ชันประมาณค่าที่ใช้

วิธียิงเป้า (Shooting Method) วิธียิงเป้ามักการง่าย ๆ คือ เราสมมุติเงื่อนไขเริ่มต้นที่ขาดหายไป แล้วดำเนินการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น จะได้ค่าที่จุดปลายสุดซึ่งอาจไม่ตรงกับเงื่อนไข แล้วทำการเปลี่ยนค่าจุดเริ่มต้น เพื่อให้ค่าที่จุดปลายสอดคล้องกับเงื่อนไขที่กำหนด หลักการดังกล่าวเหมือนกับการยิงเป้า คือ เราปรับทิศทางที่จุดเริ่มต้นโดยเล็งไปที่เป้า เมื่อยิงไปแล้วถ้าไม่ถูกเป้าก็ต้องปรับทิศทางใหม่จนกว่าจะยิงถูกเป้า

สำหรับวิธีการยิงเป้ามักมีข้อดีหลายข้อ ข้อหนึ่งคือใช้ได้กับระบบสมการเชิงอนุพันธ์ที่เป็นแบบเชิงเส้นและไม่เป็นแบบเชิงเส้น และกับระบบสมการเชิงอนุพันธ์ที่มีขนาดใหญ่ โดยที่ไม่ยุ่งยากมากนัก และอีกข้อหนึ่งคือมีค่าคลาดเคลื่อนน้อย เพราะสามารถใช้ระเบียบวิธีแก้ปัญหาค่าเริ่มต้นที่มีประสิทธิภาพได้ (เช่น วิธีของรุงเง-คุตตา อันดับสี่ หรือวิธีตัวทำนาย-ตัวแก้) ข้อเสีย คือ อาจไม่ลู่เข้าและไม่สามารถบอกได้แน่นอนว่าจะลู่เข้าหรือไม่

วิธีรุงเง-คุตตา แบบไม่ชัดแจ้งแนวเดียว

Butcher (1987) วิธีรุงเง-คุตตา แบบไม่ชัดแจ้ง วิธีการนี้ใช้สำหรับประมาณค่าคำตอบของระบบสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง

กำหนดระบบสมการเชิงอนุพันธ์ $y' = f(x, y)$, m สมการ

รูปทั่วไปของวิธีรุงเง-คุตตา แบบไม่ชัดแจ้ง คือ

$$\phi(y_n, y_{n+1}) = y_{n+1} - y_n - h_n \sum_{r=1}^s \omega_r k_r = 0 \quad (2.1)$$

$$\text{เมื่อ} \quad k_r = f\left(x_n + c_r h_n, y_n + h_n \sum_{j=1}^s \beta_{rj} k_j\right), \quad r = 1, 2, \dots, s \quad (2.2)$$

เมื่อ $y_n \approx y(x_n)$, $y_{n+1} \approx y(x_{n+1})$ และ $h_n = x_{n+1} - x_n$; $n = 0, 1, \dots, N$
 ω_r , β_{rj} และ c_r เป็นค่าคงที่ที่ต้องการหา ส่วน s เป็นตัวเลขที่บอกจำนวนขั้น

(s-stage Runge-Kutta formula)

Burrage, Chipman and Muir (1994) Parameterized Implicit Runge-Kutta (PIRK) ซึ่งเป็นลักษณะหนึ่งของวิธีรุงเง-คุตตา แบบไม่ชัดแจ้ง ได้ถูกนำเสนอในรูปแบบ

$$\phi(y_n, y_{n+1}) = y_{n+1} - y_n - h_n \sum_{r=1}^s \omega_r k_r = 0 \quad (2.3)$$

$$\text{เมื่อ} \quad k_r = f\left(x_n + c_r h_n, (1 - \gamma_r) y_n + \gamma_r y_{n+1} + h_n \sum_{j=1}^{r-1} \beta_{rj} k_j\right), \quad r = 1, 2, \dots, s \quad (2.4)$$

สำหรับสัมประสิทธิ์ที่นิยามในวิธีการข้างต้นสามารถนำมาเขียนในรูปของตารางได้ดังนี้

c_1	γ_1	β_{11}	β_{12}	$\dots$	β_{1s}
c_2	γ_2	β_{21}	β_{22}	$\dots$	β_{2s}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
c_s	γ_s	β_{s1}	β_{s2}	$\dots$	β_{ss}
		ω_1	ω_2	$\dots$	ω_s

$$\text{เมื่อ } c_i = \gamma_i + \sum_{j=1}^s \beta_{ij} \text{ และ } \sum_{r=1}^s \omega_r = 1$$

ถ้าสัมประสิทธิ์ $[\beta_{rj}]$ ของวิธี PIRK เป็นเมทริกซ์แบบสามเหลี่ยมล่างโดยแท้ (strictly lower triangular) แล้ว เราจะเรียกวิธีที่มีลักษณะดังกล่าวว่า วิธีรุ่งเง-คุตดา แบบไม่ซัดแจ้ง แนวเดียว

Enright and Muir (1993) สัมประสิทธิ์ที่นิยามในวิธี MIRK (2.3), (2.4) เขียนในรูปของตารางดังนี้

c_1	γ_1	0	0	$\dots$	0	0
c_2	γ_2	β_{21}	0	$\dots$	0	0
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
c_s	γ_s	β_{s1}	$\dots$	β_{ss-1}	0	0
		ω_1	ω_2	$\dots$	ω_{s-1}	ω_s

Burrage, Chipman and Muir (1994) ได้แสดงให้เห็นว่า วิธี MIRK s ขั้น จะมีอันดับอย่างมาก $s+1$

Ascher, Mattheij and Russell (1988) การแก้ปัญหามหาสมการเชิงอนุพันธ์สามัญในสมการแบบอันดับผสมที่กำหนดค่าขอบสองจุด ซึ่งมีรูปสมการทั่วไปเป็น

$$y_i^{(m_i)} = f_i(x, \mathbf{z}(x)), \quad a < x < b, \quad i = 1, 2, \dots, d \quad (2.5)$$

$$\text{เมื่อ } \mathbf{z}(x) = (y_1, y_1', \dots, y_1^{(m_1-1)}, \dots, y_d, y_d', \dots, y_d^{(m_d-1)})$$

เงื่อนไขค่าขอบ

$$g(\mathbf{z}(a), \mathbf{z}(b)) = 0$$

$$g: \mathbb{R}^{m_1} \times \dots \times \mathbb{R}^{m_d} \rightarrow \mathbb{R}^m$$

$$\text{เมื่อ } m = \sum_{i=1}^d m_i$$

โดยวิธี MIRK ทำได้โดยแปลงสมการ (2.5) เป็นระบบสมการอันดับหนึ่ง

$$\begin{aligned} u^{(0)} &= y_1, \\ u^{(1)} &= \frac{dy_1}{dx}, \\ &\vdots \\ u^{(m_1-1)} &= \frac{d^{m_1-1}y_1}{dx^{m_1-1}}, \\ &\vdots \\ u^{(m-2)} &= \frac{d^{m-2}y_{m-1}}{dx^{m-2}}, \\ u^{(m-1)} &= \frac{d^{m-1}y_{m-1}}{dx^{m-1}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

นั่นคือ

$$w' = \begin{pmatrix} u^{(0)} \\ u^{(1)} \\ \vdots \\ u^{(m_1-1)} \\ \vdots \\ u^{(m-2)} \\ u^{(m-1)} \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} u^{(1)} \\ u^{(2)} \\ \vdots \\ f^1(x, u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(m-1)}) \\ \vdots \\ u^{(m-1)} \\ f^d(x, u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(m-1)}) \end{pmatrix} = F(w) \quad (2.7)$$

เงื่อนไขค่าขอบ (แบบแยกได้)

$$g_a(u(a)) = 0, \quad g_b(u(b)) = 0 \quad (2.8)$$

เมื่อ $u \in \mathbb{R}^m$, $f: \mathbb{R}^{m+1} \rightarrow \mathbb{R}^m$, $g_a: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{l_1}$, $g_b: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^{l_2}$ โดย $l_1 + l_2 = m$

Enright and Muir (1996) เริ่มต้นด้วยการแบ่งช่วง $[a, b]$ เป็น N ช่วง ด้วยจุด

$T = (x_0, x_1, \dots, x_N)^T$ เมื่อ $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$ ความกว้างของช่วง $h_i = x_{i+1} - x_i$

จากนั้นแก้ระบบสมการ $\Phi(Y) = 0$ จะได้ผลเฉลย $W = (w_0, w_1, \dots, w_N)^T$ ซึ่งจะเป็นคำตอบโดยประมาณของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญที่กำหนดค่าขอบ นั่นคือ $w_i \approx y(x_i)$ สำหรับ $i = 0, 1, 2, \dots, N$ โดย Φ (Residual Function) ได้จากสูตรรุ่งเง-กูดตา (2.3) - (2.4) ประยุกต์กับ (2.6) - (2.8) แต่เนื่องจากสูตรรุ่งเง-กูดตา ขึ้นอยู่กับจุดสองจุดที่ติดกัน ดังนั้น Φ อยู่ในรูปแบบ

$$\Phi(W) = \begin{pmatrix} \Phi_a(W) \\ \Phi_0(W) \\ \Phi_1(W) \\ \vdots \\ \Phi_{N-1}(W) \\ \Phi_b(W) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_a(w_0) \\ \phi_0(w_0, w_1) \\ \phi_1(w_1, w_2) \\ \vdots \\ \phi_{N-1}(w_{N-1}, w_N) \\ g_b(w_N) \end{pmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

แก้ระบบสมการ $\Phi(W) = 0$ นี้ โดยเริ่มจากกำหนด $W^{(0)} = (w_0^{(0)}, w_1^{(0)}, \dots, w_N^{(0)})^T$ เป็นจุดเริ่มต้น และแก้ระบบสมการโดยใช้วิธีกระทำซ้ำเดิมของนิวตัน ซึ่งมีรูปแบบเป็น

$$\Phi'(W^{(i)}) \Delta W^{(i)} = -\Phi(W^{(i)})$$

โดย $\Phi'(W)$ คือ เมทริกซ์จาโคเบียน

สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial g_a^{(i)}}{\partial w_0} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{\partial \phi_0^{(i)}}{\partial w_0} & \frac{\partial \phi_0^{(i)}}{\partial w_1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{\partial \phi_{N-1}^{(i)}}{\partial w_{N-1}} & \frac{\partial \phi_{N-1}^{(i)}}{\partial w_N} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{\partial g_b^{(i)}}{\partial w_N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta w_0^{(i)} \\ \vdots \\ \Delta w_N^{(i)} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} g_a(w_0^{(i)}) \\ \phi_0^{(i)} \\ \vdots \\ \phi_{N-1}^{(i)} \\ g_b(w_N^{(i)}) \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

เมื่อ $w_j^{(i+1)} = w_j^{(i)} + \Delta w_j^{(i)}$, $j = 0, 1, \dots, N$ และ i เป็นจำนวนครั้งของการกระทำซ้ำหยุดกระทำเมื่อ $\|\Delta w^{(i)}\| < TOL$ เมื่อ TOL เป็นค่าน้อยๆ

เอกสารและบทความที่เกี่ยวข้อง

Ascher et al., (1988) วิธีของนิวตันหารากของสมการ

$$\Phi(W) = 0$$

สูตรในการกระทำซ้ำ

$$W^{(i+1)} = G(W^{(i)}) \quad , i = 0, 1, 2, \dots$$

สูตรกระทำซ้ำในแบบนิวตันจะเป็น

$$G(W) = W - \Phi'(W)^{-1} \Phi(W)$$

ในทางปฏิบัติเราไม่หาตัวผกผันของ $\Phi'(W)$ เพราะต้องใช้แรงงานสูง เราจึงใช้สูตรต่อไปนี้แทน คือ

$$\Phi'(W^{(i)}) \Delta(W^{(i)}) = -\Phi(W^{(i)})$$

เมื่อ

$$\Delta(W^{(i)}) = W^{(i+1)} - W^{(i)}$$

วิธีของนิวตันมีอัตราการลู่เข้าเป็นอันดับสอง ซึ่งสามารถศึกษาการวิเคราะห์อัตราการลู่เข้าของนิวตันใน อำเภอ ธรรมเจริญ (2532)

David (2002) การนับ Floating-Point Operations (FLOPs) เป็นการคำนวณความสิ้นเปลืองของการใช้แรงงานในการกระทำทางคณิตศาสตร์ (เช่น การบวก, การคูณ เป็นต้น) ตัวอย่างการนับ FLOP เช่น

การคูณเมทริกซ์กับเวกเตอร์

กำหนดเมทริกซ์ A มีมิติ $n \times m$ และ เวกเตอร์ x มีมิติ $m \times 1$ คูณเมทริกซ์ A ด้วยเวกเตอร์ x จะได้ผลลัพธ์เป็น $b = Ax$ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ คือ

```

b ← 0
for i = 1, ..., n
    [ for j = 1, ..., m
      [ bi ← bi + aijxj
    ]
  ]

```

การคำนวณข้างต้นใช้แรงงานในการกระทำ $2nm$ flop

การคูณเมทริกซ์กับเมทริกซ์

กำหนดเมทริกซ์ A มีมิติ $n \times m$ และ เวกเตอร์ X มีมิติ $m \times p$ คูณเมทริกซ์ A ด้วยเมทริกซ์ X จะได้ผลลัพธ์เป็น $B = AX$ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ คือ

```

b ← 0
for i = 1, ..., n
    [ for j = 1, ..., p
      [ for k = 1, ..., m
        [ bij ← bij + aikxkj
      ]
    ]
  ]

```

การคำนวณใช้แรงงานในการกระทำ $2nmp$ flop

Enright and Min (1995) การเพิ่มประสิทธิภาพในการแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสูงและอันดับผสม โดยวิธีรุงเง-คุตตา วิธีการที่เขาเสนอ คือ

กำหนดสมการเชิงอนุพันธ์อันดับ m

$$\frac{d^m y}{dx^m} = f\left(y, \frac{dy}{dx}, \frac{d^2 y}{dx^2}, \dots, \frac{d^{m-1} y}{dx^{m-1}}\right) \quad (2.11)$$

แปลงเป็นระบบสมการอันดับหนึ่งโดยกำหนดตัวแปรใหม่

$$\begin{aligned} u^{(0)} &= y, \\ u^{(1)} &= \frac{dy}{dx}, \\ u^{(2)} &= \frac{d^2 y}{dx^2}, \\ &\vdots \\ u^{(m-1)} &= \frac{d^{m-1} y}{dx^{m-1}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

นั่นคือ

$$w' = \begin{pmatrix} u^{(0)} \\ u^{(1)} \\ \vdots \\ u^{(m-2)} \\ u^{(m-1)} \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} u^{(1)} \\ u^{(2)} \\ \vdots \\ u^{(m-1)} \\ f(u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(m-1)}) \end{pmatrix} = F(w) \quad (2.13)$$

พิจารณาเฉพาะเมทริกซ์จาโคเบียนของระบบสมการนี้ จะได้

$$\frac{\partial F}{\partial w} = J = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ \frac{\partial f}{\partial u^{(0)}} & \frac{\partial f}{\partial u^{(1)}} & \frac{\partial f}{\partial u^{(2)}} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial u^{(m-2)}} & \frac{\partial f}{\partial u^{(m-1)}} \end{pmatrix}$$

การคำนวณ $J \cdot A$ เมื่อ A เป็นเมทริกซ์ $m \times m$ จะได้ผลลัพธ์ใน $m-1$ แถวแรก เหมือนกับเมทริกซ์ A ที่ตัดแถวแรกออก ส่วนผลลัพธ์ในแถว m แถวสุดท้ายเป็นผลการคำนวณผลคูณภายใน จะได้ว่าแรงงานที่ต้องใช้ในการคำนวณคือ m^2 flop ในขณะที่การคำนวณตามปกติต้องใช้แรงงาน m^3 flop ซึ่งจะเห็นได้ว่าสามารถลดการสิ้นเปลืองแรงงานได้ สำหรับสมการแบบอันดับผสมใช้หลักการและได้ผลลัพธ์ทำนองเดียวกัน จากการทดสอบโดยใช้ MIRKDC (Enright & Muir, 1993) ซึ่งผลก็คือ สามารถลดการใช้แรงงานได้ 10-34 เปอร์เซ็นต์ เมื่อใช้วิธี MIRK อันดับ 6 และลดการใช้แรงงานได้ 12-44 เปอร์เซ็นต์ เมื่อใช้วิธี MIRK อันดับ 4

Zuberi (1996) นำเสนอวิธีลดการสิ้นเปลืองแรงงานในการแก้ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญอันดับสูง (2.11) โดยแปลงเป็นระบบสมการอันดับหนึ่ง (2.12) และประมาณค่าเมทริกซ์จาโคเบียน ปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสูงที่เขานำเสนอเป็นกรณีที่เป็นปัญหาค่าขอบของสมการเชิงอนุพันธ์สามัญอันดับสอง

พิจารณาเฉพาะเมทริกซ์จาโคเบียนของระบบสมการนี้ จะได้

$$\Phi'(W) = \begin{pmatrix} B_a & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \tilde{L}_0 & \tilde{R}_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \tilde{L}_{N-1} & \tilde{R}_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B_b \end{pmatrix}$$

$$\text{เมื่อ } B_a = \frac{\partial g_a}{\partial w_0}, \quad B_b = \frac{\partial g_b}{\partial w_N}$$

สำหรับ $n = 0, \dots, N-1$

$$\tilde{L}_n = \begin{pmatrix} -I & -h\alpha I \\ -h\alpha f_0 & -I - h\alpha f_1 \end{pmatrix}$$

เมื่อ $1 - \gamma = \alpha$

$$\tilde{R}_n = \begin{pmatrix} I & -h\gamma I \\ -h\gamma f_0 & I - h\gamma f_1 \end{pmatrix}$$

ซึ่งผลการทดสอบสามารถลดการใช้แรงงานได้ 2-97 เปอร์เซ็นต์ เมื่อใช้วิธี
MIRK แบบ 5 ชั้น อันดับ 6