มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี

# ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข สำหรับคอมพิวเตอร์

ประภาศรี อัศวกุล

# ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับคอมพิวเตอร์
# Numerical Methods for Computer

**ประภาศรี อัศวกุล**

**ข้อมูลทางบรรณานุกรม**

ประภาศรี อัศวกุล

ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับคอมพิวเตอร์ = Numerical methods for computer / ประภาศรี อัศวกุล.
นครราชสีมา : สาขาวิชาคณิตศาสตร์ สำนักวิชาวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี, 2552.

268 หน้า : ภาพประกอบ

ISBN 978-974-533-621-6

QA377 ป464อ7 2552

มทส สวว.ค36 ป464ร6 2552

1. คณิตศาสตร์. 2. ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข. I. มหาวิทยาลัยเทคโนโลยีสุรนารี. สาขาวิชาคณิตศาสตร์.
II. ชื่อเรื่อง.

**ราคา 170 บาท**

**พิมพ์ครั้งที่ 1 พ.ศ. 2552 จำนวน 200 เล่ม**

**พิมพ์ครั้งที่ 2 พ.ศ. 2552 จำนวน 200 เล่ม**

พิมพ์ที่ บริษัท วีรพล โอเอ จำกัด

348 ถ.สุรนารี ต.ในเมือง อ.เมือง จ.นครราชสีมา

โทร. 0-4424-8961-3 , แฟกซ์. 0-4424-2662

# คำนำ

วิธีเชิงตัวเลข (numerical methods) ได้รับการพัฒนาขึ้นอย่างต่อเนื่อง เพื่อให้เป็นเครื่องมือสำคัญในการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์ วิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง ในกรณีที่การหาผลเฉลยโดยวิธีเชิงวิเคราะห์ (analytical methods) มีความสลับซับซ้อนจนไม่สามารถดำเนินการได้โดยง่าย วิธีเชิงตัวเลขมีพัฒนาการคู่ขนานและมีบทบาทสำคัญอย่างยิ่งในการสนับสนุนความก้าวหน้าด้านเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ ทั้งที่เป็นการประมวลผลแบบเป็นอันดับ (serial processing) การประมวลผลแบบเวกเตอร์ (vector processing) และการประมวลผลแบบขนาน (parallel processing) ซึ่งเป็นแนวโน้มใหม่ในการประมวลผลในคอมพิวเตอร์ยุคปัจจุบัน ประการหลังนี้เอง ทำให้เกิดการวิจัยและพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขอย่างก้าวกระโดด โดยเน้นการคิดค้นและพัฒนาอัลกอริทึม(algorithms) เพื่อให้ได้วิธีเชิงตัวเลขซึ่งมีประสิทธิภาพสูง สามารถประยุกต์กับคอมพิวเตอร์ที่มีสถาปัตยกรรมแบบขนานได้อย่างลงตัว ดังนั้น อาจสรุปได้ว่า ความก้าวหน้าด้านเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ทั้งในอดีตและปัจจุบัน มีอิทธิพลอย่างสูงต่อการกำหนดทิศทางการวิจัย และการพัฒนาวิชาวิธีเชิงตัวเลขเช่นกัน ส่งผลให้วิธีเชิงตัวเลขไม่เป็นเพียงทฤษฎีที่นักคณิตศาสตร์คิดค้นและพัฒนาขึ้นบนกระดาษเท่านั้น แต่เป็นวิธีการที่นักวิทยาศาสตร์และวิศวกร สามารถนำไปประยุกต์ในการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์ของตนได้อย่างเป็นรูปธรรมและมีประสิทธิภาพ

แนวทางและหลักการของการวิเคราะห์เชิงตัวเลขที่ใช้พัฒนาวิธีเชิงตัวเลข มีรากฐานมาจากวิชาทางคณิตศาสตร์ระดับพื้นฐานถึงระดับสูง ได้แก่ แคลคูลัส (calculus) พีชคณิตเชิงเส้น (linear algebra) สมการเชิงอนุพันธ์ (differential equations) การวิเคราะห์เชิงจริงและเชิงซ้อน (real and complex analysis) โทโพโลยี (topology) และการวิเคราะห์ฟังก์ชันนัล (functional analysis) เป็นต้น โดยมีการผสมผสานทฤษฎีและสมบัติตลอดจนจุดแด่นของคณิตศาสตร์ในวิชาเหล่านี้ ทฤษฎีและสมบัติทางคณิตศาสตร์ทำหน้าที่เป็นสถาปนิกออกแบบและผลิตวิธีเชิงตัวเลขต่างๆ อีกทั้งนักคณิตศาสตร์ยังได้คิดค้นทฤษฎีใหม่ๆ อันเป็นผลสืบเนื่องจากการพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขโดยตรง เพื่อพิสูจน์ความสมเหตุสมผล (validity) ปรับปรุงอันดับการลู่เข้า (order of convergence) ความเสถียร (stability) ตลอดจนขอบเขตของค่าคลาดเคลื่อน (error bound) เมื่อประยุกต์กับการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ เป็นต้น

หนังสือเล่มนี้ประกอบด้วย 9 บท ครอบคลุมเนื้อหาวิชาระเบียบวิธีเชิงตัวเลขสำหรับคอมพิวเตอร์ (numerical methods for computer) สำหรับนักศึกษาในสาขาวิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ สามารถนำไปประยุกต์กับการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์โดยใช้คอมพิวเตอร์ในวิชาชีพของตนได้ และอาจศึกษาค้นคว้าเพิ่มเติมจากแหล่งค้นคว้าอื่น ๆ โดยง่าย ผู้เขียนหวังเป็นอย่างยิ่งว่า นักศึกษาจะสามารถใช้หลักการ วิธีการ และแนวทางในวิชานี้ ให้เกิดประโยชน์ได้ทั้งทางตรงและทางอ้อม ตลอดจนสามารถสร้างแรงบันดาลใจในการค้นคว้าและพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขใหม่ ๆ ซึ่งมีประสิทธิภาพสำหรับการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์ที่มีความซับซ้อนมากขึ้นได้เองในอนาคต

ประภาศรี อัศวกุล

# สารบัญ


| | | หน้า |
|---|---|---|
| **คำนำ** | | i |
| **สารบัญ** | | iii |
| **บทที่ 1** | **บทนำ** | 1 |
| 1.1 | วิธีเชิงตัวเลข | 1 |
| 1.2 | การคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์ | 2 |
| 1.3 | ขั้นตอนวิธี | 5 |
| **บทที่ 2** | **การแทนเลขในคอมพิวเตอร์** | 10 |
| 2.1 | ระบบเลขฐานสอง | 10 |
| 2.2 | ระบบเลขฐานสิบหก | 15 |
| 2.3 | การแทนแบบอิงดรรชนี | 17 |
| 2.4 | การแทนเลขในคอมพิวเตอร์ | 18 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 2 | | 27 |
| **บทที่ 3** | **พหุนามเทย์เลอร์** | 29 |
| 3.1 | การคำนวณฟังก์ชันพหุนาม | 29 |
| 3.2 | พหุนามเทย์เลอร์ | 37 |
| 3.3 | ค่าคลาดเคลื่อนตัดปลาย | 45 |
| 3.4 | อนุกรมเทย์เลอร์ | 57 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 3 | | 63 |

| | |
|---|---|
| | **หน้า** |
| **บทที่ 4 การอินเทอร์โพเลต** | **65** |
| 4.1 พหุนามอินเทอร์โพเลต | 65 |
| 4.2 พหุนามอินเทอร์โพเลตลากรองจ์ | 73 |
| 4.3 ผลต่างตัวหาร | 83 |
| 4.4 พหุนามอินเทอร์โพเลตผลต่างตัวหารนิวตัน | 96 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 4 | 108 |
| **บทที่ 5 การฟิตข้อมูล** | **111** |
| 5.1 การฟิตข้อมูลโดยวิธีกำลังสองน้อยสุด | 111 |
| 5.2 การถดถอยเชิงเส้น | 114 |
| 5.3 การแปลงให้เป็นเชิงเส้น | 120 |
| 5.4 การถดถอยเชิงพหุนาม | 127 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 5 | 129 |
| **บทที่ 6 การหารากของสมการไม่เชิงเส้น** | **131** |
| 6.1 รากของฟังก์ชัน | 131 |
| 6.2 วิธีแบ่งครึ่ง | 137 |
| 6.3 วิธีนิวตัน | 141 |
| 6.3.1 การหารากโดยวิธีนิวตัน | 141 |
| 6.3.2 การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อน | 144 |
| 6.3.3 รากซ้ำ | 146 |
| 6.4 วิธีซีแคนท์ | 151 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 6 | 154 |

| | หน้า |
|---|---|
| **บทที่ 7 ผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้น** - G-J | 156 |
| 7.1 ระบบสมการเชิงเส้น | 156 |
| 7.1.1 วิธีตรง | 161 |
| 7.1.2 วิธีทำซ้ำ | 162 |
| 7.2 วิธีกำจัดแบบเกาส์ | 164 |
| 7.2.1 การดำเนินการแบบแถว | 165 |
| 7.2.2 การคำนวณตัวคูณของแถวหลัก | 169 |
| 7.2.3 การหาตัวหลัก | 174 |
| 7.2.4 การแยกตัวประกอบ $LU$ | 176 |
| 7.3 วิธีทำซ้ำ | 187 |
| 7.3.1 การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อน | 194 |
| 7.3.2 วิธีทำซ้ำเกาส์ – ยาโคบี | 197 |
| 7.3.3 วิธีทำซ้ำเกาส์ –ไซเดล Gauss - Seide | 206 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 7 | 211 |
| **บทที่ 8 การหาปริพันธ์เชิงตัวเลข** | 215 |
| 8.1 การหาปริพันธ์เชิงตัวเลข | 215 |
| 8.2 หลักเกณฑ์การประมาณพื้นที่ | 216 |
| 8.3 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมผืนผ้า | 218 |
| 8.3.1 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมผืนผ้า | 218 |
| 8.3.2 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมผืนผ้าประกอบ | 220 |
| 8.4 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมคางหมู | 223 |
| 8.3.1 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมคางหมู | 223 |
| 8.3.2 หลักเกณฑ์รูปสี่เหลี่ยมคางหมูประกอบ | 224 |

| | | หน้า |
|---|---|---|
| 8.5 | หลักเกณฑ์ซิมป์สัน | 229 |
| | 8.5.1 หลักเกณฑ์ซิมป์สัน | 229 |
| | 8.5.2 หลักเกณฑ์ซิมป์สันประกอบ | 231 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 8 | | 235 |
| **บทที่ 9** | **ผลเฉลยเชิงตัวเลขของสมการเชิงอนุพันธ์** | 238 |
| 9.1 | การหาอนุพันธ์เชิงตัวเลข | 238 |
| | 9.1.1 การประมาณอนุพันธ์อันดับหนึ่ง | 239 |
| | 9.1.2 การวิเคราะห์ค่าคลาดเคลื่อน | 241 |
| | 9.1.3 การประมาณอนุพันธ์อันดับสูง | 244 |
| 9.2 | การหาผลเฉลยเชิงตัวเลขของสมการเชิงอนุพันธ์ | 248 |
| 9.3 | วิธีออยเลอร์ | 251 |
| 9.4 | วิธีอนุกรมเทย์เลอร์ | 256 |
| 9.5 | วิธีรุงเง – คุตตาอันดับสี่ | 258 |
| แบบฝึกหัดบทที่ 9 | | 265 |
| **บรรณานุกรม** | | 268 |

# บทที่ 1

# บทนำ (Introduction)

## 1.1 วิธีเชิงตัวเลข (Numerical Methods)

วิธีเชิงตัวเลขเป็นวิธีที่พัฒนาขึ้น ในวิชาการวิเคราะห์เชิงตัวเลข (numerical analysis) ซึ่งเป็นสาขาหนึ่งของคณิตศาสตร์ ที่นำทฤษฎีทางคณิตศาสตร์จากขั้นพื้นฐานถึงระดับสูง มาสร้างวิธีการสำหรับแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์โดยตรง ปัญหาวิทยาศาสตร์ และปัญหาทางวิศวกรรมศาสตร์ ตลอดจนปัญหาในทางปฏิบัติอื่นๆ ที่จำเป็นต้องอาศัยแบบจำลองเชิงคณิตศาสตร์ (mathematical models) เหตุที่ทำให้เกิดวิธีเชิงตัวเลข คือ การที่วิธีเชิงคณิตศาสตร์ ซึ่งเป็นผลสืบเนื่องจากทฤษฎีหรือสมบัติเชิงคณิตศาสตร์นั้น โดยทั่วไปแล้วมักมีขอบเขตจำกัดในการประยุกต์ หรือในบ่อยครั้งไม่สามารถใช้เป็นเครื่องมือในการแก้ปัญหาทางปฏิบัติได้โดยตรง ทั้งนี้เนื่องจากวิธีเชิงคณิตศาสตร์นั้นคิดค้นขึ้น เพื่อเน้นจุดเด่นของทฤษฎีหรือสมบัติเชิงคณิตศาสตร์ โดยให้ผู้ศึกษามีความเข้าใจ ความคุ้นเคย และมีทักษะในการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์เป็นหลัก อีกทั้งให้ผู้ศึกษาที่มีศักยภาพทางคณิตศาสตร์เกิดความสนใจที่จะค้นคว้าศึกษาเพิ่มเติม เพื่อพัฒนาทฤษฎีทางคณิตศาสตร์ใหม่ ๆ ขึ้น แม้กระทั่งวิธีที่ใช้ในกลุ่มวิชาคณิตศาสตร์ประยุกต์นั้น ก็ยังคงเป็นเพียงวิธีเชิงทฤษฎีอยู่ ซึ่งสามารถนำไปประยุกต์ได้ ก็ต่อเมื่อข้อกำหนดและเงื่อนไขบังคับเป็นไปตามที่ระบุไว้ในทฤษฎีเท่านั้น ขอบเขตนี้จึงเป็นกรอบบังคับที่จำกัดการประยุกต์กับปัญหาจริงๆ

วิธีเชิงตัวเลขจึงได้รับการพัฒนาขึ้น มีการวิจัยและพัฒนาอย่างต่อเนื่อง เพื่อใช้เป็นเครื่องมือในการแก้ปัญหาในการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์ วิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ โดยเฉพาะอย่างยิ่ง ในกรณีที่การหาผลเฉลยโดยวิธีเชิงวิเคราะห์ (analytical methods) มีความสลับซับซ้อนจนไม่สามารถดำเนินการได้โดยง่าย วิธีเชิงตัวเลขมีพัฒนาการคู่ขนานและมีบทบาท

สำคัญอย่างยิ่งในการสนับสนุนความก้าวหน้าด้านเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ ทั้งที่เป็นการประมวลผลแบบเป็นอันดับ (serial processing) การประมวลผลแบบเวกเตอร์ (vector processing) และการประมวลผลแบบขนาน (parallel processing) ซึ่งเป็นแนวโน้มใหม่ในการประมวลผลในคอมพิวเตอร์ยุคปัจจุบัน ประการหลังนี้เอง ทำให้เกิดการวิจัยและพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขอย่างก้าวกระโดด โดยเน้นการคิดค้นและพัฒนาอัลกอริทึม (algorithms) เพื่อให้ได้วิธีเชิงตัวเลขที่มีประสิทธิภาพสูง สามารถประยุกต์กับคอมพิวเตอร์ที่มีสถาปัตยกรรมแบบขนานได้อย่างลงตัว ดังนั้น อาจสรุปได้ว่า ความก้าวหน้าด้านเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ทั้งในอดีตและปัจจุบัน มีอิทธิพลอย่างสูงต่อการกำหนดทิศทางการวิจัย และการพัฒนาวิชาวิธีเชิงตัวเลขเช่นกัน ส่งผลให้วิธีเชิงตัวเลขไม่เป็นเพียงทฤษฎีที่นักคณิตศาสตร์คิดค้นและพัฒนาขึ้นบนกระดาษเท่านั้น แต่เป็นวิธีการที่นักวิทยาศาสตร์และวิศวกร สามารถนำไปประยุกต์ในการแก้ปัญหาทางคณิตศาสตร์ของตนได้อย่างเป็นรูปธรรมและมีประสิทธิภาพ

แนวทางและหลักการของการวิเคราะห์เชิงตัวเลขที่ใช้พัฒนาวิธีเชิงตัวเลข มีรากฐานมาจากวิชาทางคณิตศาสตร์ระดับพื้นฐานถึงระดับสูง กล่าวคือ แคลคูลัส (calculus) พีชคณิตเชิงเส้น (linear algebra) สมการเชิงอนุพันธ์ (differential equations) การวิเคราะห์เชิงจริงและเชิงซ้อน (real and complex analysis) โทโพโลยี (topology) และการวิเคราะห์ฟังก์ชันนัล (functional analysis) เป็นต้น โดยการผสมผสานทฤษฎีและสมบัติทางคณิตศาสตร์ในวิชาเหล่านี้ กล่าวได้ว่า ทฤษฎีและสมบัติทางคณิตศาสตร์ทำหน้าที่เป็นสถาปนิกออกแบบและผลิตวิธีเชิงตัวเลขต่าง ๆ นอกจากนี้ยังมีการคิดค้นทฤษฎีใหม่ ๆ อันเป็นผลสืบเนื่องจากการพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขโดยตรง เพื่อพิสูจน์เกี่ยวกับความสมเหตุสมผล (validity) ปรับปรุงอันดับการลู่เข้า (order of convergence) ความเสถียร (stability) ขอบเขตของค่าคลาดเคลื่อน (error bound) เป็นต้น ผลการพิสูจน์จากทฤษฎียังสามารถยืนยันโดยอาศัยการเปรียบเทียบกับผลการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ได้อีกด้วย

## 1.2 การคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์ (Scientific Computing)

เป็นที่ยอมรับกันว่า ในปัจจุบันความก้าวหน้าทางเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์มีบทบาทสำคัญยิ่งต่อการศึกษาและการวิจัยทางด้านวิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ โดยเฉพาะอย่าง

ยิ่งการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ เพื่อหาผลเฉลยของปัญหาเชิงคณิตศาสตร์ที่เกิดขึ้นในปัญหาด้านวิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ ซึ่งสามารถแบ่งเป็นสองลักษณะใหญ่ ๆ กล่าวคือ

1. เมื่อรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์ถูกนำมาใช้แทนปัญหาเชิงกายภาพ

2. เมื่อปัญหาเชิงคณิตศาสตร์ปรากฏขึ้นเองโดยธรรมชาติของการศึกษาปัญหานั้น ๆ

ในทั้งสองลักษณะมีความจำเป็นในการคำนวณหาผลเฉลยของปัญหาเชิงคณิตศาสตร์ เพื่อนำผลที่ได้ไปแปลความหมาย วิเคราะห์และหาข้อสรุป วิธีและเทคนิคต่าง ๆ สำหรับการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ เพื่อหาผลเฉลยของปัญหาเชิงคณิตศาสตร์ดังกล่าว เป็นส่วนหนึ่งของการคำนวณที่เรียกว่า การคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์ และลักษณะการใช้วิธีเทคนิคต่าง ๆ ในการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ เพื่อหาแง่มุมของการวิจารณ์ การวิเคราะห์ การคาดคะเนและการหาข้อสรุป เป็นลักษณะของการศึกษาที่เรียกว่า การศึกษาวิทยาศาสตร์หรือวิศวกรรมศาสตร์เชิงคำนวณ (computational science or engineering) ซึ่งนับวันจะเป็นการศึกษาที่มีอิทธิพลอย่างยิ่ง เนื่องจากคอมพิวเตอร์ในปัจจุบันมีสมรรถนะและความเร็วสูง สามารถใช้ในการศึกษาปรากฏการณ์ทางธรรมชาติ ซึ่งมิฉะนั้นแล้วไม่มีทางเป็นไปได้ด้วยวิธีอื่น สามารถใช้ในการทดสอบสมมติฐานต่าง ๆ สามารถจัดการกับตัวแปรจำนวนมหาศาล และการเปลี่ยนค่าของพารามิเตอร์ ซึ่งไม่สามารถทำได้ในห้องทดลองหรือควบคุมได้ในธรรมชาติ การศึกษาวิทยาศาสตร์เชิงคำนวณจึงเป็นแนวทางใหม่ ที่ทำให้สามารถล่วงรู้ได้ไกลเกินกว่าการสังเกต การทดลองและทฤษฎีจะทำได้ ตลอดจนสามารถทำการจำลอง (simulation) ปรากฏการณ์ทางธรรมชาติได้ ประกอบกับการแสดงเชิงกราฟแบบหลายมิติด้วยคอมพิวเตอร์ ยังช่วยให้เห็นการเปลี่ยนแปลงของกระบวนการในขณะที่ตัวแปรมีการเปลี่ยนแปลงค่า กล่าวได้ว่าความก้าวหน้าของเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ มิเพียงทำให้เราอยู่ในยุคที่ข้อมูลถูกนำมาประมวลผลและวิเคราะห์ แต่ยังสามารถสร้างขึ้นได้ด้วยเทคนิคเชิงตัวเลข

การศึกษาวิทยาศาสตร์เชิงคำนวณครอบคลุมอย่างกว้างขวางในสาขาต่าง ๆ ทางวิทยาศาสตร์ วิศวกรรมศาสตร์ แพทยศาสตร์ สถาปัตยกรรมศาสตร์ ตลอดจนทางสังคมวิทยา เศรษฐศาสตร์ เป็นต้น ตัวอย่างเช่น

- การศึกษาคุณสมบัติของโมเลกุลในเคมีเชิงคำนวณ ด้วยวิธีแอบ - อินิชิโอ (ab initio) เพื่อคำนวณหาผลเฉลยโดยประมาณของสมการชเรอดิงเจอร์ (Schroedinger equation) สำหรับการเคลื่อนที่ของอิเล็กตรอนในโมเลกุล

- การศึกษาทางสิ่งแวดล้อม ณ ศูนย์วิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์ที่ดูปอนท์ (Dupont) ด้วยการออกแบบเชิงเคมี เพื่อหาสารที่สามารถใช้แทน CFC (Chlorofluorocarbon) โดยจะมีผลกระทบต่อสภาวะแวดล้อมน้อยที่สุด ปัญหานี้ใช้รูปแบบเชิงสิ่งแวดล้อม (environmental model) ซึ่งจำเป็นต้องใช้คอมพิวเตอร์ในการคำนวณด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข ทั้งนี้เนื่องจากต้องเป็นการวิเคราะห์ผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อมเป็นระยะเวลาหลาย ๆปีในอนาคต และต้องสามารถครอบคลุมพื้นที่บริเวณกว้างใหญ่ สิ่งเหล่านี้ไม่สามารถทำการทดลองได้ตามปกติในห้องทดลอง การใช้คอมพิวเตอร์จึงมีบทบาทสำคัญ คือ ใช้แก้ปัญหาของรูปแบบเชิงสิ่งแวดล้อม ตลอดจนใช้เป็นอุปกรณ์ในการทำนายข้อมูลรับเข้า (input data)

- การศึกษาการวิวัฒนาการของจักรวาล (cosmos) ในวิชาดาราศาสตร์ฟิสิกส์ โดยใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขจำลองรูปแบบต่าง ๆ ของระบบดาราศาสตร์ฟิสิกส์

- การแก้ปัญหาคณิตศาสตร์ที่มีความสลับซับซ้อนยิ่งในเคมีควอนตัม (quantum chemistry) โดยสมการเชิงคณิตศาสตร์ที่บรรยายการเข้าชนกันของโมเลกุลถูกลดรูปเป็นปัญหาค่าเจาะจง (eigenvalue) และพีชคณิตเชิงเส้น แล้วใช้คอมพิวเตอร์แบบเวกเตอร์ในการคำนวณแบบชนิดที่เรียกว่า "คำนวณเข้ม" (crunch) เลยทีเดียว

- การใช้พลศาสตร์ของไหลเชิงคำนวณ (computational fluid dynamics หรือ CFD) ใน อุตสาหกรรมผลิตรถยนต์ เพื่อควบคุมการไหลเวียนของอากาศในส่วนที่นั่งของผู้โดยสารในรถยนต์ การใช้วิธีเชิงตัวเลขเพื่อจำลองรูปแบบของการเกิดอุบัติเหตุรถยนต์ เพื่อการออกแบบระบบความปลอดภัยและการป้องกันการบาดเจ็บของผู้ขับขี่และผู้โดยสาร และยังมีการใช้วิธีเชิงตัวเลขอีกเช่นกันเพื่อหารูปแบบที่จะทำให้การขับเคลื่อนรถยนต์มีความนุ่มนวลและกระเทือนน้อยที่สุด โดยมีรูปแบบเชิงคณิตศาสตร์เป็นระบบของสมการพีชคณิตเชิงอนุพันธ์ (differential algebraic equations)

- การศึกษาการเคลื่อนที่ของบริเวณใต้พื้นผิวโลก การเกิดแผ่นไหว
- การพัฒนาและการจำลองแบบกระบวนการทางเภสัชศาสตร์
- การค้นหารูปแบบของโมเลกุลชีวภาพและการศึกษาเยื่อชีวภาพ (biomembranes)

ความสัมพันธ์ของวิธีเชิงตัวเลขกับการคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์คือ การที่วิธีหรือเทคนิคต่าง ๆ ที่ใช้ในการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ ส่วนใหญ่แล้วได้มาจากวิธีเชิงตัวเลขที่ได้รับการคิดค้นมาแล้ว ก่อนที่จะมีการคิดประดิษฐ์คอมพิวเตอร์เสียอีก ดังที่กล่าวมาแล้วว่า ความก้าวหน้าของเทคโนโลยีคอมพิวเตอร์ ผลักดันให้เกิดแนวทางการวิจัยและการพัฒนาวิธีเชิงตัวเลขทั้งที่คิดค้นมาแล้วและที่คิดค้นขึ้นมาใหม่ เพื่อสนองตอบการศึกษาวิทยาศาสตร์เชิงคำนวณ โดยสรุปแล้ว การคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์เป็นตัวเชื่อมต่อที่นำเอาวิธีเชิงตัวเลข ซึ่งมีรากฐานอยู่บนคณิตศาสตร์มาประสานกับวิทยาการคอมพิวเตอร์ เพื่อแก้ปัญหาทางด้านวิทยาศาสตร์และวิศวกรรมศาสตร์

## 1.3 ขั้นตอนวิธี (Algorithms)

สำหรับปัญหาคณิตศาสตร์อันเดียวกัน อาจมีการแก้ปัญหาได้หลากหลายวิธี วิธีทั้งหลายที่สามารถใช้แก้ปัญหาคณิตศาสตร์อันเดียวกัน เรียกว่า วิธีสมมูลย์เชิงคณิตศาสตร์ (equivalent mathematical methods) เช่น การหาผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้น

$$Ax = b \tag{1.3.1}$$

เมื่อ $A$ เป็นเมทริกซ์จตุรัสและมีตัวผกผัน โดยทฤษฎีทางพีชคณิตเชิงเส้น รู้แน่ชัดว่า ผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้นมีอยู่แน่นอน และมีเพียงหนึ่งเดียวเท่านั้น (unigue) สำหรับกระบวนการหาผลเฉลยของระบบสมการเชิงเส้นนี้ ทำได้โดยวิธีเชิงตัวเลขหลากหลายวิธี โดยที่การออกแบบของแต่ละวิธี จะคำนึงถึงลักษณะพิเศษของเมทริกซ์ $A$ และขนาดของเมทริกซ์ $A$ นอกจากนี้ยังต้องคำนึงถึงความเหมาะสมในทางปฏิบัติ เมื่อนำเอาวิธีเหล่านี้มาคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ โดยเฉพาะในแง่ของความแม่นยำ (accuracy) ของผลเฉลยที่คำนวณได้

อันเนื่องมาจากการแทนเลขในคอมพิวเตอร์นั้นต้องมีจำนวนตำแหน่งเป็นจำนวนจำกัด และในแง่ของความเร็วในการคำนวณ ซึ่งขึ้นอยู่กับความเหมาะสมของวิธีที่ใช้ในการแก้ปัญหา และสมรรถนะของคอมพิวเตอร์เองด้วย ด้วยเหตุผลดังกล่าว จึงมีความสำคัญอย่างยิ่งที่จะต้องแบ่งแยกกระบวนการคำนวณที่แตกต่างกัน ถึงแม้ว่าในทางคณิตศาสตร์จะสมมูลย์กัน ดังนั้นจึงเรียกกระบวนการคำนวณสำหรับปัญหาหนึ่ง ๆ ดังนี้

ขั้นตอนวิธี คือ ลำดับขั้นตอนจำนวนจำกัดซึ่งประกอบด้วยการดำเนินการพื้นฐานเชิงคณิตศาสตร์ (elementary mathematical operations) เพื่อแสดงขั้นตอนของกระบวนการคำนวณหาผลเฉลยของปัญหาด้วยข้อมูลรับเข้าที่กำหนดมาให้ ขั้นตอนวิธีควรมีความชัดเจนและมีความสะดวกในการนำไปเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ นับว่าขั้นตอนวิธีเป็นจุดเชื่อมโยงจากวิธีเชิงตัวเลขไปสู่โปรแกรมคอมพิวเตอร์

เนื่องด้วยขั้นตอนวิธีเป็นลำดับขั้นตอนที่จะนำไปเขียนโปรแกรมคอมพิวเตอร์ ดังนั้นจึงเป็นการเหมาะสมกว่าที่จะใช้คำที่ปรากฏในขั้นตอนวิธีเป็นคำอังกฤษ

**ตัวอย่างที่ 1.3.1** จงเขียนขั้นตอนวิธีแสดงการหาผลคูณ $Ax$ เมื่อ $A$ เป็นเมทริกซ์ขนาด $m \times n$ และ $x$ เป็นเวกเตอร์ขนาด $n$

**วิธีทำ** ให้ $b = Ax$

$$b = Ax = \begin{bmatrix} R_1 \cdot x \\ R_2 \cdot x \\ \vdots \\ R_m \cdot x \end{bmatrix} \tag{1.3.2}$$

เมื่อ $R_i$ คือ แถวที่ $i$ ของ $A$ และสัญกรณ์ $a \cdot b$ หมายถึง ผลคูณภายในหรือผลคูณสเกลาร์ของเวกเตอร์ $a$ และ $b$ อีกวิธีหนึ่งที่เราสามารถหาผลคูณ $Ax$ ได้คือ การเขียน $Ax$ ในรูปผลบวกเชิงเส้นของคอลัมน์ของ $A$ นั่นคือ

$$b = Ax = \sum_{i=1}^{n} x_i C_i \tag{1.3.3}$$

เมื่อ $C_i$ คือคอลัมน์ที่ $i$ ของ $A$ และ $x_i$ เป็นส่วนประกอบ (component) ตัวที่ $i$ ของเวกเตอร์ $x$

ความแตกต่างระหว่างการหาผลคูณโดยสมการ (1.3.2) และ (1.3.3) ในแง่ของการคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์ คือ การเข้าถึงข้อมูลจากเมทริกซ์ $A$ และเวกเตอร์ $x$ จากหน่วยความจำ ซึ่งตรงส่วนนี้อาจจะมีผลต่อความเร็วของการคำนวณ เช่น ในภาษาฟอร์แทรน (FORTRAN) การเก็บข้อมูลของ $A$ จะเก็บเรียงกันตามคอลัมน์ในหน่วยความจำ และในภาษาซี (C) จะเก็บเรียงกันตามแนวแถวในหน่วยความจำ ในขณะที่สมการ (1.3.2) มีความเหมาะสมมากกว่าสำหรับการคำนวณเชิงขนาน และสมการ (1.3.3) เหมาะสำหรับการคำนวณเชิงเวกเตอร์

จากสมการ (1.3.2) สามารถเขียนขั้นตอนวิธีการคำนวณโดยย่อได้ดังนี้คือ

**for** $i = 1, 2, \ldots, m$ **do**
  **for** $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**
    $b_i = b_i + a_{ij}x_j$
  **end**
**end**

หรือเพิ่มรายละเอียดมากยิ่งขึ้นเป็นดังนี้ คือ

---

**ขั้นตอนวิธี 1. 3.1** การหาผลคูณของเมทริกซ์กับเวกเตอร์

ข้อมูลเข้า : $A = (a_{ij}), \quad x = (x_i)$

  **for** $i = 1, 2, \ldots, m$ **do**
    $sum = 0$
    **for** $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**
      $sum = sum + a_{ij}x_j$
    **end**
    $b_i = sum$
  **end**

ผลลัพธ์ :

---

ในทำนองเดียวกัน จากสมการ (1.3.3) ขั้นตอนการคำนวณโดยย่อ คือ

**for** $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**
  **for** $i = 1, 2, \ldots, m$ **do**
    $b_i = b_i + a_{ij}x_j$
  **end**
**end**

หรือใส่รายละเอียดเพิ่มขึ้นเป็นขั้นตอนวิธี 1.3.2 ดังนี้

---

**ขั้นตอนวิธี 1.3.2** การหาผลคูณของเมทริกซ์กับเวกเตอร์

ข้อมูลเข้า : $A = (a_{ij}),\quad x = (x_i)$
การเริ่มต้น : ให้ $b =$ เวกเตอร์ศูนย์

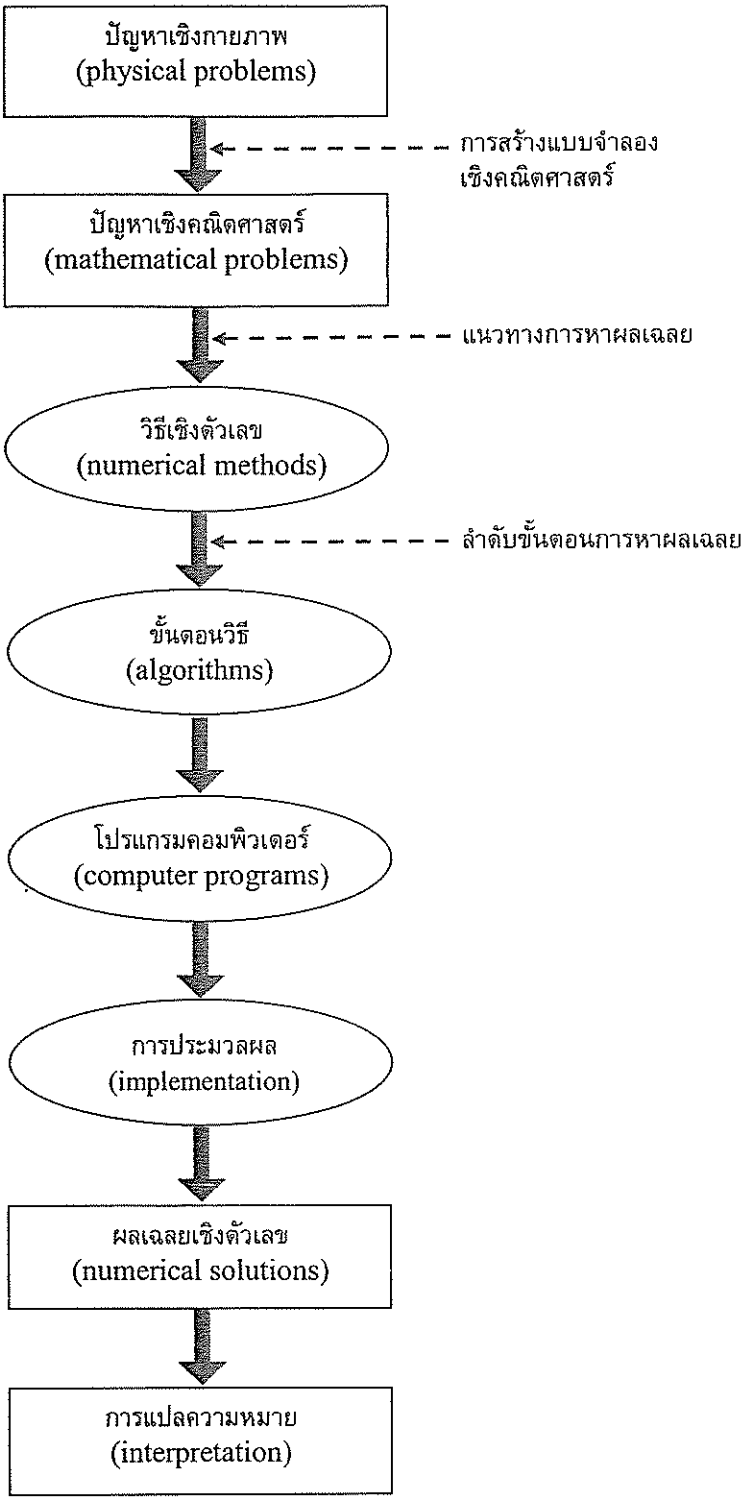
**for** $j = 1, 2, \ldots, n$ **do**

  **for** $i = 1, 2, \ldots, m$ **do**
    $b_i = b_i + a_{ij}x_j$
  **end**
  $b_i = sum$
**end**

ผลลัพธ์ : $b = (b_i) = Ax$

---

ในหัวข้อนี้ สรุปลำดับความสัมพันธ์ในแผนภาพที่ 1.3.1 โดยเริ่มต้นจากปัญหาเชิงกายภาพ จนกระทั่งถึงผลเฉลยเชิงตัวเลข ซึ่งเป็นผลเฉลยโดยประมาณของผลเฉลยจริงของปัญหาเชิงกายภาพ และท้ายสุดคือ การแปลความหมายผลเฉลยเชิงตัวเลข


ปัญหาเชิงกายภาพ
(physical problems)
การสร้างแบบจำลอง
เชิงคณิตศาสตร์
ปัญหาเชิงคณิตศาสตร์
(mathematical problems)
แนวทางการหาผลเฉลย
วิธีเชิงตัวเลข
(numerical methods)
ลำดับขั้นตอนการหาผลเฉลย
ขั้นตอนวิธี
(algorithms)
โปรแกรมคอมพิวเตอร์
(computer programs)
การประมวลผล
(implementation)
ผลเฉลยเชิงตัวเลข
(numerical solutions)
การแปลความหมาย
(interpretation)

**แผนภาพที่ 1.3.1**

# บทที่ 2
# การแทนเลขในคอมพิวเตอร์
# (Computer Representation of Numbers)

ในปัจจุบันคอมพิวเตอร์ที่ใช้การคำนวณเชิงวิทยาศาสตร์ และเกี่ยวข้องกับการคำนวณเชิงตัวเลขเป็นคอมพิวเตอร์เชิงตัวเลขหรือที่เรียกว่า ดิจิทัลคอมพิวเตอร์ (digital computer) โดยข้อมูลตัวเลขที่รับเข้าสำหรับคำนวณด้วยคอมพิวเตอร์เป็นเลขฐานสิบ (decimal number) ซึ่งเป็นแบบที่ใช้อยู่ประจำและคุ้นเคยมากที่สุด แต่การแทนเลขในคอมพิวเตอร์ที่สะดวกกว่านั้นมีพื้นฐานอยู่บนระบบเลขฐานสอง (binary number system) การเรียนรู้และความเข้าใจอย่างน้อยที่สุดในระดับเบื้องต้นเกี่ยวกับการแทนเลขในคอมพิวเตอร์ จะมีส่วนช่วยให้ผู้คำนวณใช้คอมพิวเตอร์และสามารถวิเคราะห์ผลลัพธ์ได้อย่างมีประสิทธิภาพยิ่งขึ้น ตลอดจนการรู้ข้อจำกัดและความเที่ยงในการแทนเลขในคอมพิวเตอร์แต่ละเครื่อง จะช่วยให้ผู้คำนวณเพิ่มความระวังในการแปลความหมายของผลลัพธ์ และตระหนักถึงค่าผิดพลาดที่เกิดขึ้นในผลลัพธ์อันเกิดจากข้อจำกัดนี้อีกด้วย

## 2.1 ระบบเลขฐานสอง (Binary Number System)

ระบบเลขฐานสอง คือ ระบบที่แทนเลขจำนวนใด ๆ ได้ในรูปผลบวกของผลคูณของสองยกกำลังจำนวนเต็ม โดยมี 2 เป็นฐาน (base) และมีตัวเลข (digit) เพียงสองตัวที่ใช้ใน

ระบบนี้ คือ 0 และ 1 หรือเรียกว่า บิต (bit ย่อมาจาก binary digit) ตัวเลข 0 และ 1 ทำหน้าที่เสมือนกับการปิดและเปิดของสวิทช์ไฟฟ้า ตัวอย่างของเลขฐานสอง เช่น

$$101, \quad 1111, \quad 10101.011, \quad 0.0101011, \quad 0.101101101\ldots$$

เป็นต้น

ในทำนองเดียวกับระบบเลขฐานสิบ สามารถเขียนเลขจำนวนเต็มบวกฐานสองในรูป

$$c_n 2^n + c_{n-1} 2^{n-1} + \cdots + c_1 2^1 + c_0 2^0$$

และเขียนเลขฐานสองน้อยกว่าหนึ่งในรูป

$$d_1 2^{-1} + d_2 2^{-2} + d_3 2^{-3} + \cdots$$

เมื่อสัมประสิทธิ์ $c_0, c_1, c_2, \ldots, c_n$ และ $d_1, d_2, d_3, \ldots$ เป็น 0 หรือ 1

สัญกรณ์ที่ใช้ระบุเมื่อ $x$ เป็นเลขฐาน $b$ คือ $(x)_b$ เช่น $x$ เป็นเลขฐานสิบแทนด้วยสัญกรณ์ $(x)_{10}$ และ $x$ เป็นเลขฐานสองแทนด้วยสัญกรณ์ $(x)_2$

**ตัวอย่างที่ 2.1.1** จงแปลงเลขฐานสอง 100, 1001 และ 101.011 เป็นเลขฐานสิบ

**วิธีทำ**

โดยการกระจายในรูปผลบวกของผลคูณของสองยกกำลังจำนวนเต็ม ดังนั้น

$$(100)_2 = 1\times 2^2 + 0\times 2^1 + 0\times 2^0 = (4)_{10}$$
$$(1001)_2 = 1\times 2^3 + 0\times 2^2 + 0\times 2^1 + 1\times 2^1 = (9)_{10}$$
$$(101.001)_2 = 1\times 2^2 + 0\times 2^1 + 0\times 2^0 + 0\times 2^{-1} \cancel{+1}\times 2^{-2} + 1\times 2^{-3} = (5.375)_{10}$$

□