

ระเบียบวิธีไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้  
เพื่อแก้สมการของการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา

นางสาวพัชรี ชีระเอก

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรดุษฎีบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเครื่องกล ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2555

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อและแฟ้มข้อมูลฉบับเต็มของวิทยานิพนธ์ตั้งแต่ปีการศึกษา 2554 ที่ให้บริการในคลังปัญญาจุฬาฯ (CUIR)

เป็นแฟ้มข้อมูลของนิสิตเจ้าของวิทยานิพนธ์ที่ส่งผ่านทางบัณฑิตวิทยาลัย

ADAPTIVE FINITE VOLUME ELEMENT METHOD FOR SOLVING  
THE CONVECTION-DIFFUSION-REACTION EQUATION

Miss Patcharee Theeraek

A Dissertation Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements  
for the Degree of Doctor of Philosophy Program in Mechanical Engineering

Department of Mechanical Engineering

Faculty of Engineering

Chulalongkorn University

Academic Year 2012

Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	ระเบียบวิธีไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้เพื่อ
	แก้สมการของการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา
โดย	นางสาวพัชรี ชีระเอก
สาขาวิชา	วิศวกรรมเครื่องกล
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	ศาสตราจารย์ ดร.ปราโมทย์ เฉชะอำไพ

---

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้รับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วน  
หนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาคุณวุฒิปบัณฑิต

..... คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์

(รองศาสตราจารย์ ดร.บุญสม เลิศหิรัญวงศ์)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.กฤษณี มณีรัตน์)

..... อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก

(ศาสตราจารย์ ดร.ปราโมทย์ เฉชะอำไพ)

..... กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.นิพนธ์ วรรณโสภากย์)

..... กรรมการ

(อาจารย์ ดร.ชญญาพันธ์ วิรุฬห์ศรี)

..... กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร.สุทธิศักดิ์ พงศ์ธนาพานิช)

พัชร ชีระเอก : ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้เพื่อแก้สมการของการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา. (ADAPTIVE FINITE VOLUME ELEMENT METHOD FOR SOLVING THE CONVECTION-DIFFUSION-REACTION EQUATION) อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก : ศ.ดร.ปราโมทย์ เดชะอำไพ, 107 หน้า.

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้นำเสนอการวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาภายใต้สถานะไม่อยู่ตัวในสองมิติด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ สมการไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ได้ถูกประดิษฐ์ขึ้นจากสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่สอดคล้องกับปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา การวิเคราะห์ปัญหาใช้ปริมาตรควบคุมรูปสามเหลี่ยมเพื่อหาผลลัพธ์ และโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน ได้ถูกประดิษฐ์ขึ้นเพื่อตรวจสอบความถูกต้องกับปัญหาที่มีผลเฉลยแม่นยำและปัญหาที่มีผู้หาผลลัพธ์ไว้แล้ว

เพื่อให้ผลลัพธ์ที่ได้จากการคำนวณมีความถูกต้องยิ่งขึ้นและลดเวลาที่ใช้ในการคำนวณลง จึงได้ประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ เทคนิคดังกล่าวจะสร้างปริมาตรควบคุมขนาดเล็กในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงและสร้างปริมาตรควบคุมขนาดใหญ่ในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์ต่ำ

ผลลัพธ์ที่ได้จากการวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาแสดงให้เห็นถึงประสิทธิภาพของการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่นำเสนอในวิทยานิพนธ์ฉบับนี้

ภาควิชา.....วิศวกรรมเครื่องกล.....      ลายมือชื่อนิสิต.....  
 สาขาวิชา.....วิศวกรรมเครื่องกล.....      ลายมือชื่อ อ.ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก.....  
 ปีการศึกษา.....2555.....



# # 5071872021 : MAJOR MECHANICAL ENGINEERING

KEYWORDS : CONVECTION-DIFFUSION-REACTION EQUATION / FINITE VOLUME ELEMENT METHOD / ADAPTIVE MESHING TECHNIQUE

PATCHAREE THEERA EK : ADAPTIVE FINITE VOLUME ELEMENT METHOD FOR SOLVING THE CONVECTION-DIFFUSION-REACTION EQUATION. ADVISOR : PROF. PRAMOTE DECHAUMPHAI, Ph.D., 107 pp.

In this thesis, a finite volume element method for two-dimensional, unsteady-state convection-diffusion-reaction equation is presented. The corresponding finite volume element equation is derived from the partial differential equation which satisfy the convection-diffusion-reaction problem. To analyze the convection-diffusion-reaction problems, the triangular control volumes are used. Finite volume element computer program from finite volume element equation is developed and verified by solving the problems of which exact solutions and previous numerical results are available.

To improve solution accuracy and save computational time, an adaptive meshing technique is applied to the finite volume element method. The technique places small control volumes in the region of high solution gradients, and vice versa.

Results from the convection-diffusion-reaction problems assure the efficiency of applying the finite volume element method with adaptive meshing technique, which are proposed in this thesis.

Department :     Mechanical Engineering     Student's Signature.....

Field of Study :     Mechanical Engineering     Advisor's Signature.....

Academic Year :     2012

## กิตติกรรมประกาศ

ผู้วิจัยขอขอบพระคุณ ศาสตราจารย์ ดร.ปราโมทย์ เดชะอำไพ อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ซึ่งท่านได้เมตตาถ่ายทอดความรู้ คำแนะนำ รวมถึงให้โอกาส ให้กำลังใจ ผลักดัน และให้การสนับสนุน ตลอดจนให้ข้อคิดต่าง ๆ ที่มีคุณค่าอย่างยิ่งในการทำงานและการดำเนินชีวิต อันเป็นแรงผลักดันให้ผู้วิจัยสามารถทำงานได้สำเร็จลุล่วง

ขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.กฤษณี มณีรัตน์ ประธานกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ รองศาสตราจารย์ ดร.สุทธิศักดิ์ พงศ์ธนาพานิช ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.นิพนธ์ วรรณโสภากย์ และอาจารย์ ดร.ชญญาพันธ์ วิรุฬห์ศรี คณะกรรมการ ตลอดจนศาสตราจารย์ ดร. สมศักดิ์ ไชยะภินันท์ รองศาสตราจารย์ ดร.วราภรณ์ จันทสาโร และรองศาสตราจารย์ ดร.อสิ บุญจิตราคุลย์ ผู้ให้คำแนะนำและถ่ายทอดความรู้ตลอดระยะเวลาในการทำงานวิจัยนี้ ซึ่งทำให้วิทยานิพนธ์ฉบับนี้มีความสมบูรณ์มากยิ่งขึ้น

ขอขอบพระคุณ โครงการเครือข่ายเชิงกลยุทธ์เพื่อการผลิตและพัฒนาอาจารย์ในสถาบันอุดมศึกษา สำนักงานคณะกรรมการอุดมศึกษา (สกอ.) ที่มอบทุนสนับสนุนทางการเงิน ตลอดระยะเวลาที่ทำงานวิจัยนี้

ขอขอบพระคุณ ดร.สุธี ไตรวิวัฒนา ดร.ปริญญา บุญมาเลิศ ดร.อธิพงศ์ มาลาทิพย์ คุณพิชฌนทร์ โพธิคุณ คุณณัฐชนนท์ ประสมสุข คุณชัชวาล ศิริปัฐ คุณไกรอัมพร พงษ์ขจร ตลอดจนสมาชิกของห้องปฏิบัติการวิจัยกลศาสตร์การคำนวณทั้งในอดีตและปัจจุบันทุกท่านที่มีได้กล่าวถึง ณ ที่นี้ สำหรับคำแนะนำ ความช่วยเหลือรวมทั้งให้กำลังใจในระหว่างการทำงานวิจัยนี้

ท้ายสุดนี้ผู้วิจัยขอขอบพระคุณบิดามารดา รวมถึงญาติพี่น้องที่ให้คำปรึกษาเป็นกำลังใจและสนับสนุนการศึกษาของผู้วิจัยมาโดยตลอด อนึ่งประโยชน์และคุณค่าอันใดที่ได้รับจากวิทยานิพนธ์นี้ขอมอบเป็นกตัญญูตราบูชาแด่บิดามารดา ครูอาจารย์ ตลอดจนผู้มีพระคุณทุกท่าน

## สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ง
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	จ
กิตติกรรมประกาศ.....	ฉ
สารบัญ.....	ช
สารบัญภาพ.....	ญ
คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ.....	ณ
<b>บทที่ 1 บทนำ.....</b>	<b>1</b>
1.1 ความสำคัญและที่มาของวิทยานิพนธ์.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์.....	3
1.3 ขอบเขตของวิทยานิพนธ์.....	3
1.4 ขั้นตอนดำเนินงานวิทยานิพนธ์.....	4
1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากวิทยานิพนธ์.....	4
<b>บทที่ 2 ระเบียบวิธีไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์สำหรับการแก้ปัญหา</b>	
<b>การพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา.....</b>	<b>5</b>
2.1 สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา.....	5
2.2 ระเบียบวิธีไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์.....	6
2.3 การวิเคราะห์อันดับความถูกต้องของระเบียบวิธีไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์.....	13
<b>บทที่ 3 ไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์.....</b>	<b>16</b>
3.1 ลักษณะทั่วไปของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM.....	16
3.2 รายละเอียดของไฟล์ข้อมูลนำเข้าที่ใช้กับ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM.....	20
3.3 รายละเอียดของไฟล์ข้อมูลส่งออกที่ใช้กับ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM.....	22

<b>บทที่ 4</b>	<b>เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ</b> .....	<b>24</b>
4.1	หลักการของเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ.....	24
4.2	โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ.....	28
4.3	ขั้นตอนการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ.....	29
4.4	รายละเอียดของไฟล์ข้อมูลนำเข้าสำหรับโปรแกรม FEMESH.....	31
<b>บทที่ 5</b>	<b>การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม FVEM และการวิเคราะห์ปัญหา โดยใช้เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ</b> .....	<b>32</b>
5.1	การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์.....	33
5.1.1	ปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง (the oblique step problem).....	33
5.1.2	ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem).....	36
5.1.3	ปัญหาการหมุนครบรอบของพัลส์แบบเกาส์เซียน (rotation of Gaussian pulse problem).....	37
5.1.4	ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem).....	41
5.1.5	ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem).....	44
5.1.6	ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกระงับ (rotation of slotted cylinder problem).....	46
5.1.7	ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิกส์ (Smolarkiewicz's deformational flow problem).....	48
5.2	การวิเคราะห์ปัญหาโดยใช้เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ.....	50
5.2.1	ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem).....	50
5.2.2	ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem).....	52

5.2.3 ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ (boundary layer problem).....	54
5.2.4 ปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียงเนื่องจากผลของการพา-การเกิดปฏิกิริยา (oblique inflow convection-reaction problem).....	56
5.2.5 ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม (corner layer problem).....	59
5.2.6 ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์ (advection of sine hill problem).....	61
5.2.7 ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem).....	62
<b>บทที่ 6 บทสรุป ปัญหาที่พบและข้อเสนอแนะ</b> .....	<b>65</b>
6.1 บทสรุป.....	65
6.2 ปัญหาที่พบในขณะที่ทำวิทยานิพนธ์.....	67
6.3 ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยในอนาคต.....	67
<b>รายการอ้างอิง</b> .....	<b>68</b>
<b>ภาคผนวก</b> .....	<b>72</b>
ภาคผนวก ก. รายละเอียดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM.....	72
ภาคผนวก ข. รายละเอียดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FEM_FVE.....	88
ภาคผนวก ค. รายละเอียดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVE_FEM.....	91
ภาคผนวก ง. บทความ Solving convection-diffusion-reaction equation by adaptive finite volume element method.....	93
<b>ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์</b> .....	<b>107</b>

## สารบัญภาพ

	หน้า
รูปที่ 2.1 การแบ่งโดเมนของปัญหาออกเป็นเซลล์สามเหลี่ยมย่อย ๆ.....	6
รูปที่ 2.2 รายละเอียดของปริมาตรตัวอย่าง $\Omega_i$ .....	6
รูปที่ 2.3 เซลล์ตัวอย่างแสดงตำแหน่งเวกเตอร์หมายเลข 2 ซึ่งประกอบด้วย เซลล์รูปสามเหลี่ยมจำนวน 5 เซลล์ที่มีเวกเตอร์นี้ร่วมกัน.....	12
รูปที่ 2.4 เซลล์ตัวอย่างใน 1 มิติที่มีขนาดของเซลล์เท่ากัน.....	13
รูปที่ 3.1 ขั้นตอนการทำงานของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM.....	19
รูปที่ 4.1 ขนาดของเซลล์ในแนวแกนหลัก X และ Y.....	25
รูปที่ 4.2 ลำดับขั้นตอนการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ.....	30
รูปที่ 4.3 ส่วนคำสั่งของไฟล์ 'square00.out'.....	31
รูปที่ 4.4 ส่วนผลลัพธ์ของไฟล์ 'square00.out'.....	31
รูปที่ 5.1 ลักษณะของปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง.....	34
รูปที่ 5.2 เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง.....	35
(ก) วิธี UDS.....	35
(ข) วิธี FVEM.....	35
รูปที่ 5.3 แถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง.....	35
(ก) วิธี UDS.....	35
(ข) วิธี FVEM.....	35
รูปที่ 5.4 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอัปวินด์ และวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์สำหรับปัญหาไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง.....	35
รูปที่ 5.5 ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม.....	36
รูปที่ 5.6 การกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม.....	37
(ก) วิธี UDS.....	37
(ข) วิธี FVEM.....	37
รูปที่ 5.7 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอัปวินด์ และวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม.....	37

รูปที่ 5.8	เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวสำหรับ	
	ปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 0$ ) .....	39
	(ก) วิธี UDS .....	39
	(ข) วิธี FVEM .....	39
รูปที่ 5.9	แถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวสำหรับ	
	ปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 0$ ) .....	39
	(ก) วิธี UDS .....	39
	(ข) วิธี FVEM .....	39
รูปที่ 5.10	กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง $y = 0$	
	สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 0$ ) .....	39
รูปที่ 5.11	เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของ	
	ปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ ) .....	40
	(ก) วิธี UDS .....	40
	(ข) วิธี FVEM .....	40
รูปที่ 5.12	แถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ	
	ปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ ) .....	40
	(ก) วิธี UDS .....	40
	(ข) วิธี FVEM .....	40
รูปที่ 5.13	กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง $y = 0$	
	สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบแก๊สเฉียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ ) .....	41
รูปที่ 5.14	เส้นชั้นแสดงค่าเงื่อนไขเริ่มต้นของปัญหาการไหลผสมกัน	
	ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ .....	42
รูปที่ 5.15	ผลเฉลยแม่นยำสำหรับปัญหาการไหลผสมกัน	
	ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ .....	43
รูปที่ 5.16	เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลผสมกัน	
	ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ .....	43
	(ก) วิธี UDS .....	43
	(ข) วิธี FVEM .....	43

รูปที่ 5.17	แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลผสมกัน ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ.....	43
	(ก) วิธี UDS.....	43
	(ข) วิธี FVEM.....	43
รูปที่ 5.18	กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง $y = 0$ สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มี อุณหภูมิต่ำ.....	44
รูปที่ 5.19	ปัญหาของสมิทและฮัตตัน.....	45
รูปที่ 5.20	เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปัญหาของสมิทและฮัตตัน.....	45
รูปที่ 5.21	กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณสำหรับปัญหา ของสมิทและฮัตตัน.....	45
รูปที่ 5.22	ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง.....	46
รูปที่ 5.23	ผลเฉลยแม่นยำตรงของปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง.....	47
รูปที่ 5.24	แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการหมุนครบรอบของ ทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ).....	47
	(ก) วิธี UDS.....	47
	(ข) วิธี FVEM.....	47
รูปที่ 5.25	แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการหมุนครบรอบของ ทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ ).....	47
	(ก) วิธี UDS.....	47
	(ข) วิธี FVEM.....	47
รูปที่ 5.26	ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโม่ลาร์เควิกส์.....	48
รูปที่ 5.27	เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรง ของสโม่ลาร์เควิกส์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ).....	49
	(ก) วิธี UDS.....	49
	(ข) วิธี FVEM.....	49



รูปที่ 5.28	เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโม่ลาร์เควิกส์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ )	49
	(ก) วิธี UDS	49
	(ข) วิธี FVEM	49
รูปที่ 5.29	กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณสำหรับปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโม่ลาร์เควิกส์	50
รูปที่ 5.30	แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม	51
รูปที่ 5.31	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม	51
รูปที่ 5.32	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม	51
รูปที่ 5.33	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม	52
รูปที่ 5.34	กราฟเปรียบเทียบการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ ที่ขอบขวาของโดเมน $x=1$ สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม	52
รูปที่ 5.35	แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ	53
รูปที่ 5.36	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ	53
รูปที่ 5.37	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ	53
รูปที่ 5.38	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ	54



รูปที่ 5.53	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม.....	60
รูปที่ 5.54	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม.....	60
รูปที่ 5.55	ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์.....	61
รูปที่ 5.56	แบบจำลองไฟในตัวของลูมเอลิเมนต์เริ่มแรกและเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์.....	62
รูปที่ 5.57	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์.....	62
รูปที่ 5.58	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์.....	62
รูปที่ 5.59	แบบจำลองไฟในตัวของลูมเอลิเมนต์เริ่มแรกและเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาสมิตและฮัตตัน.....	63
รูปที่ 5.60	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาสมิตและฮัตตัน.....	63
รูปที่ 5.61	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาสมิตและฮัตตัน.....	64
รูปที่ 5.62	แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาสมิตและฮัตตัน.....	64
รูปที่ 5.63	กราฟเปรียบเทียบการกระจายตัวของปริมาณ $\phi$ สำหรับปัญหาสมิตและฮัตตัน.....	64

## คำอธิบายสัญลักษณ์และคำย่อ

$A$	พื้นที่
$C$	ตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา
$h$	ความยาวแคแรกเทอร์ิสติก
$h_{\min}$	ขนาดของเซลล์ที่เล็กที่สุด
$h_1$	ความยาวของเซลล์ในทิศแกนหลัก $X$
$h_2$	ความยาวของเซลล์ในทิศแกนหลัก $Y$
$i$	ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม
$\bar{i}$	เวกเตอร์หนึ่งหน่วยในแนวแกน $x$
$j_1$	เซลล์หมายเลข 1 ที่อยู่ติดกับเซลล์ $\Omega_i$
$j_2$	เซลล์หมายเลข 2 ที่อยู่ติดกับเซลล์ $\Omega_i$
$j_3$	เซลล์หมายเลข 3 ที่อยู่ติดกับเซลล์ $\Omega_i$
$\bar{j}$	เวกเตอร์หนึ่งหน่วยในแนวแกน $y$
$M$	เมตริกซ์มวลแบบรวมตัวกันที่ตำแหน่งเวกเตอร์
$N, N_k$	ฟังก์ชันการประมาณภายใน
$N_1$	ฟังก์ชันการประมาณภายในที่ตำแหน่งเวกเตอร์ที่ 1
$N_2$	ฟังก์ชันการประมาณภายในที่ตำแหน่งเวกเตอร์ที่ 2
$N_3$	ฟังก์ชันการประมาณภายในที่ตำแหน่งเวกเตอร์ที่ 3
$n_x$	ทิศทางด้านข้างในแนวแกน $x$
$n_{x,s_1}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_1}$ ในแนวแกน $x$
$n_{x,s_2}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_2}$ ในแนวแกน $x$
$n_{x,s_3}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_3}$ ในแนวแกน $x$
$n_y$	ทิศทางด้านข้างในแนวแกน $y$
$n_{y,s_1}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_1}$ ในแนวแกน $y$
$n_{y,s_2}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_2}$ ในแนวแกน $y$
$n_{y,s_3}$	ทิศทางด้านข้างกับขอบ $\Gamma_{s_3}$ ในแนวแกน $y$
$q$	ค่าแหล่งกำเนิด
$q_i^{n+1/2}$	ค่าแหล่งกำเนิดที่ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม $i$ และเวลา $n+1/2$

$r$	รัศมี
$s_1$	ตำแหน่งกึ่งกลางขอบที่ 1 ของปริมาตรควบคุมสามเหลี่ยม
$S_1$	ขอบเขตของปัญหาแบบ Dirichlet
$s_2$	ตำแหน่งกึ่งกลางขอบที่ 2 ของปริมาตรควบคุมสามเหลี่ยม
$S_2$	ขอบเขตของปัญหาแบบ Neumann
$s_3$	ตำแหน่งกึ่งกลางขอบที่ 3 ของปริมาตรควบคุมสามเหลี่ยม
$t$	เวลา
$t^n$	เวลาที่ขั้นตอน $n$
$t^{n+1}$	เวลาที่ขั้นตอน $n+1$
$t^{n+1/2}$	เวลาที่ขั้นตอน $n+1/2$
$u$	ความเร็วในแนวแกน $x$
$\bar{u}_i$	ความเร็วในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของเซลล์ $\Omega_i$
$\bar{u}_{s_1}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_1$
$\bar{u}_{s_2}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_2$
$\bar{u}_{s_3}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_3$
$v$	ความเร็วในแนวแกน $y$
$\bar{v}_i$	ความเร็วในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของเซลล์ $\Omega_i$
$\bar{v}_{s_1}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_1$
$\bar{v}_{s_2}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_2$
$\bar{v}_{s_3}$	ความเร็วที่กำหนดให้ที่ตำแหน่ง $s_3$
$\bar{v}$	เวกเตอร์ความเร็ว
$W_k$	ฟังก์ชันน้ำหนัก
$x$	ระยะในแนวราบ
$x_i$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของเซลล์ $\Omega_i$
$x_{i+1/2}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ขอบขวาของเซลล์ $\Omega_i$
$x_{i-1/2}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ขอบซ้ายของเซลล์ $\Omega_i$
$x_{s_1}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่ง $s_1$
$x_{s_2}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่ง $s_2$
$x_{s_3}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $x$ ที่ตำแหน่ง $s_3$
$X, Y$	ทิศแกนหลัก

$y$	ระยะในแนวดิ่ง
$y_i$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $y$ ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของเซลล์ $\Omega_i$
$y_{s_1}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $y$ ที่ตำแหน่ง $s_1$
$y_{s_2}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $y$ ที่ตำแหน่ง $s_2$
$y_{s_3}$	โคออร์ดิเนตในแนวแกน $y$ ที่ตำแหน่ง $s_3$
$\Gamma_s, \Gamma_i$	พื้นผิวควบคุม
$\Gamma_{s_1}$	พื้นผิวควบคุมสำหรับขอบที่ 1
$\Gamma_{s_2}$	พื้นผิวควบคุมสำหรับขอบที่ 2
$\Gamma_{s_3}$	พื้นผิวควบคุมสำหรับขอบที่ 3
$\Delta$	ผลต่าง
$\varepsilon$	สัมประสิทธิ์การแพร่
$\kappa$	สัมประสิทธิ์การเกิดปฏิกิริยา
$\lambda_{\max}$	ค่าอนุพันธ์อันดับสองที่มีค่ามากที่สุด
$\phi$	ปริมาณสเกลาร์ใด ๆ
$\phi_i$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม $\Omega_i$
$\phi_i^n$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม $\Omega_i$ และเวลา $n$
$\phi_i^{n+1/2}$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม $\Omega_i$ และเวลา $n+1/2$
$\phi_{s_1}^{n+1/2}$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่ง $s_1$ และเวลา $n+1/2$
$\phi_{s_2}^{n+1/2}$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่ง $s_2$ และเวลา $n+1/2$
$\phi_{s_3}^{n+1/2}$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่ง $s_3$ และเวลา $n+1/2$
$\phi_i^{n+1}$	ปริมาณสเกลาร์ที่ตำแหน่งศูนย์กลางของปริมาตรควบคุม $i$ และเวลา $n+1$
$\phi_0$	ปริมาณสเกลาร์ที่เวลาเริ่มต้น
$O$	อันดับ
$\tau_{xx}$	ความเค้นตั้งฉากในแนวแกน $x$
$\tau_{XX}$	ความเค้นตั้งฉากในแนวแกนหลัก $X$
$\tau_{yy}$	ความเค้นตั้งฉากในแนวแกน $y$
$\tau_{YY}$	ความเค้นตั้งฉากในแนวแกนหลัก $Y$
$\tau_{xy}$	ความเค้นเฉือน
$\Omega$	โดเมนของปัญหา
$\Omega_i$	ปริมาตรควบคุมที่ $i$

$\Omega_{i-1}$	ปริมาตรควบคุมที่ $i-1$
$\Omega_{i-2}$	ปริมาตรควบคุมที่ $i-2$
$\Omega_{i+1}$	ปริมาตรควบคุมที่ $i+1$
$\Omega_{i+2}$	ปริมาตรควบคุมที่ $i+2$
$o$	ตัวดำเนินการเชิงอนุพันธ์ย่อย
$\bar{\nabla}$	เกรเดียนต์
$\approx$	ประมาณ

# บทที่ 1

## บทนำ

### 1.1 ความสำคัญและที่มาของวิทยานิพนธ์

การศึกษาปรากฏการณ์การเคลื่อนย้ายของปริมาณต่าง ๆ (transport phenomena) ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขได้รับความสนใจอย่างต่อเนื่องจนถึงปัจจุบัน ในการอธิบายพฤติกรรมของการเคลื่อนย้ายนี้จำเป็นต้องอาศัยการแก้สมการที่เกี่ยวข้องซึ่งอยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยนี้ประกอบด้วยพจน์ต่าง ๆ ที่อธิบายถึงลักษณะของการพา การแพร่ และการเกิดปฏิกิริยาเรียกว่าสมการการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา (convection-diffusion-reaction equation) ในการนำระเบียบวิธีเชิงตัวเลขมาวิเคราะห์สมการดังกล่าวพบว่าความยุ่งยากประการหลักที่มีผลต่อความถูกต้องแม่นยำมาจากพจน์ที่เกี่ยวข้องกับการพาซึ่งพจน์ของการพานี้ก่อให้เกิดการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงหรือเกิดความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์

ในอดีตที่ผ่านมาระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่ได้รับความนิยมอย่างมากในการวิเคราะห์ปัญหาดังกล่าวข้างต้นคือระเบียบวิธีผลต่างสืบเนื่อง (finite different method) เนื่องจากเป็นวิธีที่ไม่ซับซ้อนสามารถทำความเข้าใจได้โดยง่าย แต่มีข้อจำกัดคือในการวิเคราะห์ปัญหาด้วยระเบียบวิธีนี้จำเป็นต้องแบ่งขอบเขตของปัญหาออกเป็นตารางสี่เหลี่ยม ซึ่งหากปัญหาที่นำมาทำการวิเคราะห์มีรูปร่างซับซ้อนจะทำให้เกิดความยากลำบากในการจำลองรูปร่างของปัญหา สำหรับในปัจจุบันระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่ถูกพัฒนาขึ้นและได้รับความนิยมนำมาใช้วิเคราะห์ปัญหาสามารถแบ่งได้เป็น 2 กลุ่มคือระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method) [1] และระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่ม (finite volume method) [2]

ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มมีหลักการคร่าว ๆ คือการแบ่งโดเมนของปัญหาออกเป็นปริมาตรควบคุม (control volume) ย่อย ๆ ปริมาตรควบคุมนี้เรียกว่าเซลล์ (cell) ซึ่งถูกล้อมรอบด้วยพื้นผิวควบคุม (control surface) การคำนวณหาค่าตัวแปรต่าง ๆ อาศัยหลักความสมดุลของฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกพื้นผิวควบคุมทำให้พจน์ต่าง ๆ ที่คำนวณได้มีความหมายทางกายภาพคือมีการอนุรักษ์ค่าตัวแปรภายในปริมาตรควบคุมหนึ่ง ๆ ในปัจจุบันระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มนิยมนำมาใช้กับปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการไหลแบบอัดตัวความเร็วสูงเนื่องจากสามารถวิเคราะห์ความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์ได้อย่างแม่นยำ งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มได้ถูกนำเสนออย่างต่อเนื่องทั้งในแง่มุมมองการนำเสนอระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มที่ให้ผลลัพธ์ที่มีอันดับความถูกต้องสูง เช่น วิธี SHARP (simple high-accuracy resolution program) [3] วิธี MUSCL (monotone upwind schemes for conservation laws) [4] วิธี TVD (total variation



diminishing) [5] วิธี multistage Runge-Kutta [6] รวมถึงแง่มุมของการใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มแก้ปัญหาในด้านต่าง ๆ เช่น ปัญหาการไหลแบบหนืดแต่ไม่อัดตัว [7,8] การวิเคราะห์การไหลผ่านปีกเครื่องบินในย่านความเร็วเสียง [9] ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มที่นิยมใช้วิเคราะห์ปัญหาที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงคือระเบียบวิธีที่ใช้แนวคิดของทิศทางด้านลม (upwind-based method) [6,7]

ระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์มีหลักการคร่าว ๆ คือการแบ่งโดเมนของปัญหาออกเป็นเอลิเมนต์ (element) ย่อย ๆ แล้วจึงเลือกฟังก์ชันการประมาณภายใน (interpolation function) เพื่อประมาณค่าของตัวแปรต่าง ๆ บนเอลิเมนต์นั้น จากนั้นจึงประดิษฐ์สมการไฟไนต์เอลิเมนต์ที่สอดคล้องกับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของปัญหา สุดท้ายจึงนำสมการของแต่ละเอลิเมนต์มารวมกันเป็นระบบสมการรวมและทำการแก้ระบบสมการรวมเพื่อหาค่าตัวแปร ข้อดีของระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์คือให้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องสูงจากการเลือกใช้ฟังก์ชันการประมาณภายใน และสามารถนำมาใช้กับปัญหาที่มีรูปร่างซับซ้อนได้ดี มีวิธีการคำนวณสอดคล้องกับลักษณะของสมการเอลลิปติก (elliptic equation) งานวิจัยทางด้านระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์มีการนำเสนออย่างต่อเนื่องเช่นเดียวกัน เช่น การนำเสนอระเบียบวิธีเทย์เลอร์-กาลเลอร์กิน (Taylor-Galerkin method) [10,11] ระเบียบวิธีเพโทรฟ-กาลเลอร์กิน (Petrov-Galerkin method) [12] ระเบียบวิธีสตรีมไลน์อัปวินด์เพโทรฟ-กาลเลอร์กิน (streamline upwind Petrov-Galerkin method) [13] ระเบียบวิธีการแยกด้วยคุณลักษณะ (characteristic based split method) [14,15]

งานวิจัยที่นำข้อดีของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขทั้งสองมาใช้ร่วมกันในการวิเคราะห์ปัญหา เช่น ระเบียบวิธี CVFEM (control volume finite element method) [16] ซึ่งเป็นการใช้ฟังก์ชันน้ำหนักแบบเพโทรฟ-กาลเลอร์กินและใช้แบบจำลองสี่เหลี่ยมในการคำนวณ ผลลัพธ์จากการคำนวณมีความถูกต้องเทียบเท่ากับวิธีสตรีมไลน์อัปวินด์เพโทรฟ-กาลเลอร์กินที่ใช้ในระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ และระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ (finite volume element method) [17,18] นำเสนอการแบ่งย่อยสมการของการพา-การแพร่-ปฏิกิริยาด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่ม และใช้หลักการของระเบียบวิธีถ่วงน้ำหนักเศษตค้ำงในการหาค่าเกรเดียนต์ของการแพร่ ระเบียบวิธีดังกล่าวเป็นระเบียบวิธีแบบชัดเจน ใช้เวลาในการคำนวณน้อยในขณะที่ให้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องถึงอันดับสอง นอกจากนี้ยังมีงานวิจัยอื่น ๆ ที่เกี่ยวข้องกับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ [19] โดยนำเสนอการแก้สมการพาราโบลิก (parabolic equation) ในสองมิติโดยได้นำเสนอระเบียบวิธีที่แตกต่างกันถึงสามแบบ

ระเบียบวิธีทั้งสองยังสามารถแบ่งตามลักษณะการคำนวณออกได้เป็น 2 วิธีหลัก ๆ คือระเบียบวิธีแบบชัดเจน (explicit scheme) และระเบียบวิธีแบบไม่ชัดเจน (implicit scheme)

ระเบียบวิธีแบบชัดเจนได้รับความนิยมอย่างแพร่หลายในปัจจุบันเนื่องจากสามารถนำมาประยุกต์ใช้ได้ง่าย และการที่ไม่ต้องแก้ระบบสมการรวมใหญ่ทำให้ใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำบนเครื่องคอมพิวเตอร์น้อยกว่า อย่างไรก็ตามระเบียบวิธีดังกล่าวมีข้อจำกัดคือหากใช้ช่วงเวลา (time step) ที่สูงเกินไปอาจทำให้ผลลัพธ์จากการคำนวณลู่ออก

ในการนำระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มหรือไฟไนต์เอลิเมนต์มาใช้วิเคราะห์หาผลเฉลยโดยทั่วไปนั้น ความถูกต้องของผลลัพธ์จะขึ้นอยู่กับขนาดของเซลล์หรือขนาดของเอลิเมนต์ กล่าวคือ หากต้องการความถูกต้องของผลลัพธ์สูงก็จำเป็นต้องใช้เซลล์หรือเอลิเมนต์ที่มีขนาดเล็กเป็นจำนวนมาก โดยเฉพาะในบริเวณที่เกิดการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูง แต่การใช้เซลล์หรือเอลิเมนต์ขนาดเล็กจำนวนมากตลอดทั้งโดเมนของปัญหาทำให้ต้องใช้เวลาในการคำนวณและหน่วยความจำเพิ่มมากขึ้นโดยไม่จำเป็น ดังนั้นการนำเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ (adaptive meshing technique) มาใช้ร่วมกับระเบียบวิธีเชิงตัวเลขดังกล่าวก็จะทำให้การแก้ปัญหามีประสิทธิภาพมากขึ้น งานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับเทคนิคการปรับขนาดเมช เช่น เทคนิคการปรับขนาดเมชที่ประกอบด้วยเซลล์สี่เหลี่ยม [20] เทคนิคการปรับขนาดเมชที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยม [21-23]

งานวิทยานิพนธ์นี้จึงขอเสนอการแก้ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาภายใต้สภาวะไม่อยู่ตัวในสองมิติด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้ ซึ่งเป็นการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์วิธีการดังกล่าวเป็นวิธีแบบชัดเจนทำให้ใช้เวลาในการคำนวณน้อย โดยให้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องในอันดับสูง (higher-order resolution) ในขณะที่เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติจะเพิ่มประสิทธิภาพของการคำนวณให้ได้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องแม่นยำมากยิ่งขึ้นโดยไม่จำเป็นต้องใช้หน่วยความจำบนเครื่องคอมพิวเตอร์และใช้เวลาในการคำนวณมากเกินไป

## 1.2 วัตถุประสงค์ของวิทยานิพนธ์

เพื่อศึกษาระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์และประติสัมพันธ์สมการไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่สอดคล้องกับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา รวมถึงประติสัมพันธ์ไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์และนำมาใช้ร่วมกับเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติสำหรับวิเคราะห์ปัญหาภายใต้สภาวะไม่อยู่ตัวในสองมิติด้วยเซลล์สามเหลี่ยม

## 1.3 ขอบเขตของวิทยานิพนธ์

- ### 1.3.1 ประติสัมพันธ์สมการไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์และโปรแกรมคอมพิวเตอร์ไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่สอดคล้องกับสมการของการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสองมิติ

- 1.3.2. ประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติเข้ากับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้น
- 1.3.3. แสดงประสิทธิภาพของการใช้เทคนิคการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติร่วมกับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้น โดยนำไปใช้วิเคราะห์ปัญหาที่มีความซับซ้อน

#### 1.4 ขั้นตอนดำเนินงานวิทยานิพนธ์

- 1.4.1 ศึกษาระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์สำหรับปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสถานะไม่อยู่ตัวในสองมิติ
- 1.4.2 ประดิษฐ์สมการไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์และโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกันโดยใช้เซลล์สามเหลี่ยม
- 1.4.3 ทดสอบโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้นกับปัญหาอย่างง่ายที่มีผลเฉลยแม่นยำหรือปัญหาที่มีผู้หาผลลัพธ์ไว้แล้ว
- 1.4.4 ประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติเข้ากับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้น
- 1.4.5 นำโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ปรับปรุงแล้วไปใช้แก้ปัญหาที่มีความซับซ้อนมากขึ้น
- 1.4.6 เขียนวิทยานิพนธ์
- 1.4.7 สอบวิทยานิพนธ์

#### 1.5 ประโยชน์ที่ได้รับจากวิทยานิพนธ์

- 1.5.1 สามารถนำเทคนิคการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติมาใช้ร่วมกับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ประดิษฐ์ขึ้นจากระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ได้
- 1.5.2 สามารถนำโปรแกรมที่ปรับปรุงแล้วไปใช้วิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาที่มีความซับซ้อนได้
- 1.5.3 สามารถลดหน่วยความจำ (RAM) และเวลาที่ต้องใช้ในการคำนวณบนเครื่องคอมพิวเตอร์ลงได้
- 1.5.4 เป็นแนวทางสำหรับศึกษาและพัฒนาวิชาการด้านไฟไนต์วอลุ่มและไฟไนต์เอลิเมนต์สำหรับผู้วิจัยในอนาคตต่อไป

## บทที่ 2

### ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์สำหรับการแก้ปัญหา

#### การพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา

บทที่ 2 จะกล่าวถึงการใช้ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์เพื่อแก้ปัญห การพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา โดยระเบียบวิธีดังกล่าวประกอบด้วยการนำหลักการของวิธีไฟไนต์วอลุ่มเซลล์เซนเตอร์ (cell-centered finite volume method) มาประยุกต์บนปริมาตรควบคุม (control volume) รูปทรงสามเหลี่ยมย่อย ๆ ภายในโดเมนของปัญหา เนื่องจากระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มสามารถนำมาใช้กับปัญหาที่ผลลัพธ์มีลักษณะไม่ต่อเนื่องได้เป็นอย่างดี และใช้หลักการของวิธีการถ่วงน้ำหนักเศษตค้ำงในระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method) เพื่อคำนวณหาปริมาณเกรเดียนต์ที่อยู่บนผิวควบคุม (control surface) สำหรับพจน์ของการแพร่

#### 2.1 สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยของปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา

สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่เกี่ยวข้องของปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยา (convection-diffusion-reaction equation) ภายใต้สภาวะไม่คงตัวในสองมิติ โดยมีตัวแปรไม่ทราบค่าเป็นปริมาณสเกลาร์  $\phi(x, y, t)$  สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{v}\phi - \epsilon \nabla \phi) + \kappa \phi = q \quad (2.1)$$

โดยที่  $\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial}{\partial y} \bar{j}$  และ  $\bar{v} = u\bar{i} + v\bar{j}$

สมการ(2.1) สามารถแสดงให้อยู่ในรูปแบบกระจายดังนี้

$$\underbrace{\frac{\partial \phi}{\partial t}}_{\text{Temporal term}} + \underbrace{\frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y}}_{\text{Convection terms}} - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)}_{\text{Diffusion terms}} + \underbrace{\kappa \phi}_{\text{Reaction term}} = \underbrace{q}_{\text{Source term}} \quad (2.2)$$

โดยที่  $u = u(x, y)$  หมายถึงความเร็วที่กำหนดบนโดเมนของปัญหาในแนวแกน  $x$

$v = v(x, y)$  หมายถึงความเร็วที่กำหนดบนโดเมนของปัญหาในแนวแกน  $y$

$\epsilon$  แทนค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่

$\kappa$  แทนค่าสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยา

$q = q(x, y, t)$  หมายถึงพจน์เนื่องจากแหล่งกำเนิด

เงื่อนไขขอบเขต (boundary condition) ของปัญหาดังกล่าวข้างต้นประกอบด้วย

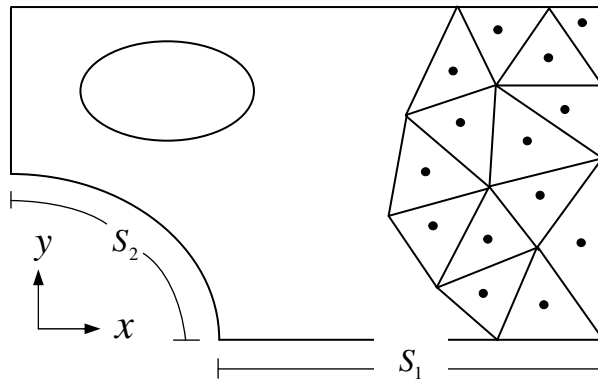
(1)  $S_1 = \phi(x, y, t)$  เป็นการกำหนดปริมาณสเกลาร์  $\phi$  บนผิวนอกของโดเมน

(2)  $S_2 = \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} n_x + \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} n_y$  เป็นการกำหนดปริมาณฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกขอบนอกของโดเมน

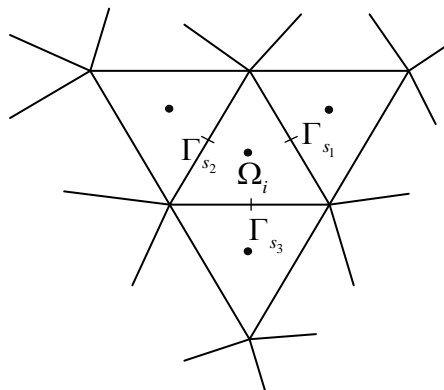
เงื่อนไขเริ่มต้น (initial condition) ของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  กำหนดโดย  $\phi(x, y, 0) = \phi_0(x, y)$

## 2.2 ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์

ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่ใช้ในงานวิจัยนี้เริ่มจากการใช้วิธีไฟไนต์วอลุ่ม (finite volume method) โดยแบ่งโดเมนของปัญหาออกเป็นปริมาตรควบคุม (control volume) รูปสามเหลี่ยมเล็ก ๆ เรียกว่าเซลล์ (cell) กำหนดให้ปริมาณไม่ทราบค่าที่จะทำการคำนวณหาถูกเก็บค่าอยู่ที่ตำแหน่งจุดศูนย์กลาง (centroid) ของปริมาตรควบคุมนั้นดังแสดงในรูปที่ 2.1 ซึ่งวิธีการเช่นนี้เรียกว่าวิธีเซลล์เซนเตอร์ (cell-centered method) รายละเอียดของปริมาตรตัวอย่างแสดงในรูปที่ 2.2 โดย  $\Omega_i$  หมายถึงปริมาตรควบคุม  $i$  ประกอบด้วยพื้นผิวควบคุม (control surface) ที่ติดกับปริมาตรข้างเคียงคือด้านทั้งสามของปริมาตรนั้น ได้แก่  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ



รูปที่ 2.1 การแบ่งโดเมนของปัญหาออกเป็นเซลล์สามเหลี่ยมย่อย ๆ



รูปที่ 2.2 รายละเอียดของปริมาตรตัวอย่าง  $\Omega_i$

การคำนวณหาค่าของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์เริ่มจากการอินทิเกรตสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่เกี่ยวข้องซึ่งในที่นี้คือสมการ (2.2) ทั่วทั้งปริมาตร  $\Omega_i$  และอินทิเกรตจากช่วงเวลา  $t^n$  จนถึง  $t^{n+1}$  ดังนี้

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_i} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \kappa \phi - q \right) d\Omega dt = 0 \quad (2.3)$$

เมื่อกำหนดให้ปริมาณสเกลาร์  $\phi_i$  มีค่าคงที่และมีค่าเท่ากับค่าเฉลี่ยของปริมาณ  $\phi$  ที่อยู่ภายในปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  กล่าวคือ

$$\phi_i(t) = \frac{1}{|\Omega_i|} \int_{\Omega_i} \phi(x, y, t) d\Omega \quad (2.4)$$

โดยที่  $|\Omega_i|$  หมายถึงพื้นที่ของปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  ทำให้พจน์แรกทางซ้ายมือของสมการ (2.3) สามารถเขียนให้อยู่ในรูปของสมการเชิงอนุพันธ์และเมื่อประมาณค่าด้วยวิธีของออยเลอร์ (Euler's method) ซึ่งเป็นระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit method) นั่นคือ

$$\frac{d\phi_i}{dt} \approx \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t} \quad (2.5)$$

โดยที่  $\phi_i^{n+1}$  และ  $\phi_i^n$  หมายถึงค่าเฉลี่ยของปริมาณ  $\phi$  บนปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  ที่เวลา  $t^{n+1}$  และ  $t^n$  ตามลำดับ

พจน์ที่เกี่ยวข้องกับการพา-การแพร่ในสมการ (2.3) สามารถประยุกต์ทฤษฎีบทของไดเวอร์เจนซ์ (divergence theorem) เข้ากับพจน์ดังกล่าว ทำให้สมการลดรูปลงจากการอินทิเกรตภายในปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  เป็นการอินทิเกรตของฟลักซ์ผ่านพื้นผิวควบคุมของปริมาตรนั้น นั่นคือ

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_i} \left[ \frac{\partial(u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) \right] d\Omega dt \\ = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Gamma_s} \left[ \left( u\phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) n_x + \left( v\phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) n_y \right] d\Gamma dt \end{aligned} \quad (2.6)$$

พจน์ทางขวามือหมายถึงผลรวมของฟลักซ์เนื่องจากการพาและการแพร่ซึ่งผ่านเข้าออกขอบของเซลล์ในช่วงเวลา  $[t^n, t^{n+1}]$  เมื่อประยุกต์กฎการหาค่าอินทิกรัลที่จุดกึ่งกลางควอดดราเจอร์ (midpoint quadrature integration rule) เข้ากับพจน์ดังกล่าวทั้งโดเมนในทางมิติและทางเวลา

ทำให้ค่าที่ประมาณได้เป็นผลรวม (summation) ของฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกที่ตำแหน่งกึ่งกลางขอบ ทั้งสามของเซลล์สามเหลี่ยม ที่เวลา  $t^{n+1/2}$  ซึ่งสามารถแสดงรายละเอียดได้ดังนี้

$$\begin{aligned}
& \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Gamma_s} \left[ \left( u \phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) n_x + \left( v \phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) n_y \right] d\Gamma dt \\
&= \Delta t \left| \Gamma_{s_1} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_1}^{n+1/2} \right) n_{x,s_1} + \left( \bar{v}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_1}^{n+1/2} \right) n_{y,s_1} \right] \\
&+ \Delta t \left| \Gamma_{s_2} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_2}^{n+1/2} \right) n_{x,s_2} + \left( \bar{v}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_2}^{n+1/2} \right) n_{y,s_2} \right] \\
&+ \Delta t \left| \Gamma_{s_3} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_3}^{n+1/2} \right) n_{x,s_3} + \left( \bar{v}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_3}^{n+1/2} \right) n_{y,s_3} \right] \quad (2.7)
\end{aligned}$$

โดยที่  $\left| \Gamma_{s_1} \right|$ ,  $\left| \Gamma_{s_2} \right|$  และ  $\left| \Gamma_{s_3} \right|$  แทนความยาวของขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

$\bar{u}_{s_1}$ ,  $\bar{u}_{s_2}$  และ  $\bar{u}_{s_3}$  แทนความเร็วในแนวแกน  $x$  ที่ตำแหน่งกึ่งกลางขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

$\bar{v}_{s_1}$ ,  $\bar{v}_{s_2}$  และ  $\bar{v}_{s_3}$  แทนความเร็วในแนวแกน  $y$  ที่ตำแหน่งกึ่งกลางขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

$n_{x,s_1}$ ,  $n_{x,s_2}$  และ  $n_{x,s_3}$  แทนทิศทางโคไซน์ในแนวแกน  $x$  ของเวกเตอร์ตั้งฉากกับขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

$n_{y,s_1}$ ,  $n_{y,s_2}$  และ  $n_{y,s_3}$  แทนทิศทางโคไซน์ในแนวแกน  $y$  ของเวกเตอร์ตั้งฉากกับขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

$\phi_{s_1}^{n+1/2}$ ,  $\phi_{s_2}^{n+1/2}$  และ  $\phi_{s_3}^{n+1/2}$  แทนปริมาตรสเกลาร์  $\phi$  ณ เวลา  $t^{n+1/2}$  ที่ตำแหน่งกึ่งกลางขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$  และ  $\Gamma_{s_3}$  ตามลำดับ

เพื่อความสะดวกในการคำนวณเราอาจประมาณค่าเกรเดียนต์ที่เวลา  $t^{n+1/2}$  ของสมการ (2.7) ด้วยค่าเกรเดียนต์ที่เวลา  $t^n$  นั่นคือ

$$\begin{aligned}
& \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Gamma_s} \left[ \left( u \phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) n_x + \left( v \phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) n_y \right] d\Gamma dt \\
&= \Delta t \left| \Gamma_{s_1} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_1}^n \right) n_{x,s_1} + \left( \bar{v}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_1}^n \right) n_{y,s_1} \right] \\
&+ \Delta t \left| \Gamma_{s_2} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_2}^n \right) n_{x,s_2} + \left( \bar{v}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_2}^n \right) n_{y,s_2} \right] \\
&+ \Delta t \left| \Gamma_{s_3} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_3}^n \right) n_{x,s_3} + \left( \bar{v}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_3}^n \right) n_{y,s_3} \right] \quad (2.8)
\end{aligned}$$

พจน์ที่เกี่ยวข้องกับการเกิดปฏิกิริยาและแหล่งกำเนิดสามารถใช้วิธีประมาณค่าเฉลี่ยที่เวลา  $t^{n+1/2}$  ได้เช่นกัน กล่าวคือ

$$\int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \kappa \phi dt d\Omega = \Delta t \left| \Omega_i \right| \kappa \phi_i^{n+1/2} \quad (2.9)$$

$$\text{และ} \quad \int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} q dt d\Omega = \Delta t \left| \Omega_i \right| q_i^{n+1/2} \quad (2.10)$$

แทนพจน์ต่าง ๆ ในสมการ (2.3) ด้วยค่าที่ได้จากการแบ่งย่อยในสมการ (2.5) และสมการ (2.8) – (2.10) จะได้สมการที่อยู่ในรูปแบบชัดเจน ดังนี้

$$\begin{aligned}
\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{\left| \Omega_i \right|} & \left\{ \left| \Gamma_{s_1} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_1}^n \right) n_{x,s_1} + \left( \bar{v}_{s_1} \phi_{s_1}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_1}^n \right) n_{y,s_1} \right] \right. \\
& + \left| \Gamma_{s_2} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_2}^n \right) n_{x,s_2} + \left( \bar{v}_{s_2} \phi_{s_2}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_2}^n \right) n_{y,s_2} \right] \\
& \left. + \left| \Gamma_{s_3} \right| \left[ \left( \bar{u}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{s_3}^n \right) n_{x,s_3} + \left( \bar{v}_{s_3} \phi_{s_3}^{n+1/2} - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_{s_3}^n \right) n_{y,s_3} \right] \right\} \\
& - \Delta t \left( \kappa \phi_i^{n+1/2} - q_i^{n+1/2} \right) \quad (2.11)
\end{aligned}$$

ปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่เวลา  $t^{n+1/2}$  ในสมการ (2.11) สามารถประมาณค่าด้วยการกระจายอนุกรมเทย์เลอร์อันดับสอง (second order Taylor's series expansion) โดยคำนวณอ้างอิงกับทิศทางของเซลล์ต้นลม (upwinding direction) หากสมมติให้ปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่อยู่บนขอบ  $\Gamma_{s_1}$ ,  $\Gamma_{s_2}$



และ  $\Gamma_{s_3}$  มีทิศทางจากเซลล์  $i$  ไปยังเซลล์  $j_1, j_2$  และ  $j_3$  ตามลำดับ จะสามารถประมาณค่าที่ขอบได้ดังนี้

$$\phi_{s_1}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_1} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_1} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n \quad (2.12ก)$$

$$\phi_{s_2}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_2} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_2} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n \quad (2.12ข)$$

$$\phi_{s_3}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_3} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_3} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n \quad (2.12ค)$$

$$\phi_i^{n+1/2} = \phi_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_i^n \quad (2.13)$$

พจน์สุดท้ายของสมการ (2.12ก-ค) และสมการ (2.13) ซึ่งเป็นอนุพันธ์ย่อยที่เกี่ยวข้องกับเวลาสามารถแปลงให้อยู่ในรูปของอนุพันธ์ที่เกี่ยวข้องกับมิติได้โดยใช้หลักการของความสัมพันธ์ของตัวแปรบนแกนคุณลักษณะ ทำให้สมการ (2.12ก-ค) และสมการ (2.13) สามารถแสดงได้ดังนี้

$$\phi_{s_1}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_1} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_1} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left( \bar{u}_i \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + \bar{v}_i \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n \right) \quad (2.14ก)$$

$$\phi_{s_2}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_2} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_2} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left( \bar{u}_i \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + \bar{v}_i \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n \right) \quad (2.14ข)$$

$$\phi_{s_3}^{n+1/2} = \phi_i^n + (x_{s_3} - x_i) \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + (y_{s_3} - y_i) \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left( \bar{u}_i \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + \bar{v}_i \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n \right) \quad (2.14ค)$$

$$\phi_i^{n+1/2} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{2} \left( \bar{u}_i \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_i^n + \bar{v}_i \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_i^n \right) \quad (2.15)$$

โดยที่  $\bar{u}_i$  และ  $\bar{v}_i$  แทนความเร็วที่จุดศูนย์กลางของเซลล์  $\Omega_i$  ในแนวแกน  $x$  และ  $y$  ตามลำดับ

พจน์ของเกรเดียนต์ที่เกิดจากการประมาณค่าด้วยอนุกรมเทย์เลอร์ในสมการ (2.14ก-ค) และสมการ (2.15) และพจน์ของเกรเดียนต์อันเนื่องมาจากการแพร่ในสมการ (2.11) สามารถคำนวณได้โดยใช้วิธีถ่วงน้ำหนักเศษตคก้างซึ่งมาจากแนวคิดของระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ โดยการสมมติให้เกรเดียนต์ดังกล่าวมีการกระจายเป็นแบบเชิงเส้นไปบนปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  และสามารถเขียนให้อยู่ในรูปของผลรวมค่าเกรเดียนต์ที่ตำแหน่งเวอร์เทกซ์ (vertex) ของปริมาตรควบคุมนั้น กล่าวคือ

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n = N_1 \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_1 + N_2 \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_2 + N_3 \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_3 = \underset{(1 \times 3)}{[N]} \underset{(3 \times 1)}{\left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\}} \quad (2.16)$$

$$\text{และ} \quad \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_i^n = N_1 \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_1 + N_2 \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_2 + N_3 \left. \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|_3 = \underset{(1 \times 3)}{[N]} \underset{(3 \times 1)}{\left\{ \frac{\partial \phi}{\partial y} \right\}} \quad (2.17)$$

โดย  $[N]$  แทนฟังก์ชันการประมาณแบบเชิงเส้นภายในเซลล์รูปสามเหลี่ยม ทำการสร้างสมการไฟไนต์เอลิเมนต์โดยใช้วิธีถ่วงน้ำหนักเศษตคค้างและเลือกใช้ฟังก์ชันน้ำหนัก (weighting function) ตามวิธีของบับโนฟ-กาเลอร์กิน (Buvnov-Galerkin) นั่นคือฟังก์ชันน้ำหนักมีค่าเท่ากับฟังก์ชันการประมาณภายในปริมาตรควบคุม,  $W_k = N_k$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \int_{\Omega_i} N_k \frac{\partial \phi}{\partial x} d\Omega \quad (2.18)$$

$$\text{และ} \quad \frac{\partial \phi}{\partial y} = \int_{\Omega_i} N_k \frac{\partial \phi}{\partial y} d\Omega \quad (2.19)$$

โดยตัวห้อย  $k = 1, 2$  และ  $3$  หมายถึงตำแหน่งเวกเตอร์ของเซลล์สามเหลี่ยม ทำการประยุกต์ทฤษฎีบทของเกาส์ (Gauss's theorem) เข้ากับพจน์ทางขวามือของสมการ(2.18) และสมการ (2.19) จะก่อให้เกิด

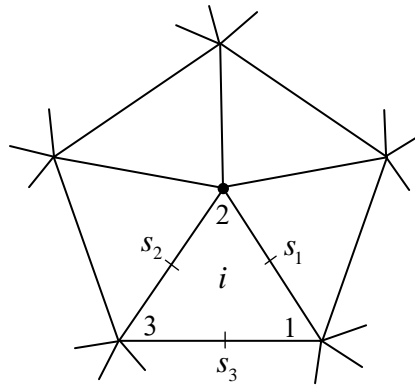
$$\int_{\Omega_i} \{N\} [N] d\Omega \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} = \int_{\Gamma_s} \{N\} \phi_i n_x d\Gamma - \int_{\Omega_i} \left\{ \frac{\partial N}{\partial x} \right\} \phi_i d\Omega \quad (2.20)$$

$$\int_{\Omega_i} \{N\} [N] d\Omega \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial y} \right\} = \int_{\Gamma_s} \{N\} \phi_i n_y d\Gamma - \int_{\Omega_i} \left\{ \frac{\partial N}{\partial y} \right\} \phi_i d\Omega \quad (2.21)$$

เมื่อแทนสัมประสิทธิ์ทางซ้ายมือด้วยเมตริกซ์มวลแบบรวมตัวกันที่ตำแหน่งเวกเตอร์ (lumped mass matrix) เพื่อช่วยให้สามารถแก้สมการย่อย ๆ ในระบบสมการได้โดยตรง ซึ่งเป็นข้อดีของระเบียบวิธีแบบชัดเจน จะสามารถคำนวณหาปริมาณเกรเดียนต์ที่เวกเตอร์ทั้งสามอันเนื่องมาจากปริมาณเกรเดียนต์บนเซลล์  $\Omega_i$  ได้ดังนี้

$$\left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \bar{j} \right\} = [M]^{-1} \left[ \int_{\Gamma_s} \{N\} \phi_i (n_x \bar{i} + n_y \bar{j}) d\Gamma - \int_{\Omega_i} \left\{ \frac{\partial N}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial N}{\partial y} \bar{j} \right\} \phi_i d\Omega \right] \quad (2.22)$$

$$\text{โดยที่ } [M] = \frac{|\Omega_i|}{3} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$



รูปที่ 2.3 เซลล์ตัวอย่างแสดงตำแหน่งเวกเตอร์หมายเลข 2 ซึ่งประกอบด้วย  
เซลล์รูปสามเหลี่ยมจำนวน 5 เซลล์ที่มีเวกเตอร์นี้ร่วมกัน

ปริมาณเกรเดียนต์ที่ตำแหน่งเวกเตอร์ใด ๆ บนโดเมนสามารถคำนวณได้จากผลรวมของปริมาณเกรเดียนต์ในสมการ (2.22) บนเซลล์ที่ประกอบด้วยเวกเตอร์นี้ร่วมกันดังแสดงไว้ในเซลล์ตัวอย่างในรูปที่ 2.3 ซึ่งแสดงตำแหน่งเวกเตอร์หมายเลข 2 ประกอบด้วยเซลล์ล้อมรอบจำนวน 5 เซลล์

สำหรับค่าเกรเดียนต์ที่จุดกึ่งกลางขอบทั้งสามของปริมาตรควบคุม  $s_1, s_2$  และ  $s_3$  สามารถคำนวณได้โดยการเฉลี่ยค่าเกรเดียนต์ที่เวกเตอร์นั้น ๆ นั่นคือ

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \bar{j} \right)_{s_1} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_1 + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_2 \right) \bar{i} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_1 + \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_2 \right) \bar{j} \quad (2.23ก)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \bar{j} \right)_{s_2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_2 + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_3 \right) \bar{i} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_2 + \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_3 \right) \bar{j} \quad (2.23ข)$$

$$\left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \bar{i} + \frac{\partial \phi}{\partial y} \bar{j} \right)_{s_3} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_3 + \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_1 \right) \bar{i} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_3 + \frac{\partial \phi}{\partial y} \Big|_1 \right) \bar{j} \quad (2.23ค)$$

เนื่องจากระเบียบวิธีไฟไนต์ออลูเมนต์ที่นำเสนอในงานวิจัยนี้เป็นระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง การคำนวณจะถูกจำกัดด้วยการใช้ช่วงเวลา (time step)  $\Delta t$  เพื่อไม่ให้ผลลัพธ์จากการคำนวณลู่ออก (diverged solution) โดยที่ช่วงเวลาดังกล่าวของเซลล์แต่ละเซลล์สามารถคำนวณได้จาก

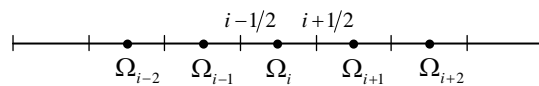
$$\Delta t = C \min_i \left( \frac{|\Omega_i|}{\max_{s,s=1,2,3} \left( |\Gamma_s| \sqrt{u_n^2 + v_n^2} \right)}, \frac{|h|^2}{2\varepsilon} \right) \quad (2.24)$$

โดยที่  $h$  แทนความยาวแคแรกเทอร์ริสติกของเซลล์  $\Omega_i$ ,  $u_n, v_n$  แทนความเร็วในทิศทางตั้งฉากและสัมผัสกับขอบของเซลล์ และ  $0 \leq C \leq 1$

สมการ (2.11) ที่ใช้ในการคำนวณสามารถนำไปประดิษฐ์เป็นโปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้โดยตรงซึ่งขั้นตอนการทำงานและรายละเอียดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ประดิษฐ์ขึ้นนี้จะกล่าวถึงรายละเอียดในบทที่ 3

### 2.3 การวิเคราะห์อันดับความถูกต้องของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์

การวิเคราะห์ความถูกต้องของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่นำเสนอในงานวิจัยนี้สามารถทำได้โดยการหาความผิดพลาดจากการตัดปลาย (truncation error) บนปริมาตรควบคุมใน 1 มิติ โดยกำหนดให้ปริมาตรควบคุมนี้มีขนาดเท่า ๆ กันทุกเซลล์ นั่นคือ  $|\Omega_i| = \Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$  ดังแสดงในรูปที่ 2.4



รูปที่ 2.4 เซลล์ตัวอย่างใน 1 มิติที่มีขนาดของเซลล์เท่ากัน

สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่สอดคล้องกับปัญหาการพา-การแพร่ในสภาวะไม่คงตัวใน 1 มิติ คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( u\phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.25)$$

เมื่อทำการแบ่งย่อยสมการ (2.25) ด้วยขั้นตอนในหัวข้อ 2.2 จะสามารถแสดงสมการของปริมาตรควบคุม  $\Omega_i$  ในรูปของสมการกึ่งไม่ต่อเนื่อง (semi-discrete) ได้ดังนี้

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{u \Delta t}{\Delta x} (\phi_{i+1/2}^{n+1/2} - \phi_{i-1/2}^{n+1/2}) + \frac{\varepsilon \Delta t}{\Delta x} \left( \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2}^n - \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1/2}^n \right) \quad (2.26)$$

ใช้สูตรเทย์เลอร์อันดับสองประมาณค่าตัวแปร  $\phi_{i+1/2}^{n+1/2}$  และ  $\phi_{i-1/2}^{n+1/2}$  ดังนี้

$$\phi_{i+1/2}^{n+1/2} = \phi_i^n + \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_i^n \quad (2.27ก)$$

และ

$$\phi_{i-1/2}^{n+1/2} = \phi_{i-1}^n + \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1}^n + \frac{\Delta t}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{i-1}^n \quad (2.27ข)$$

อาศัยหลักการของความสัมพันธ์ของตัวแปรบนแกนคุณลักษณะในทำนองเดียวกับสมการ (2.14ก-ค) จะได้

$$\phi_{i+1/2}^{n+1/2} = \phi_i^n + \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n - \frac{u \Delta t}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n \quad (2.28ก)$$

และ

$$\phi_{i-1/2}^{n+1/2} = \phi_{i-1}^n + \frac{\Delta x}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1}^n - \frac{u \Delta t}{2} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1}^n \quad (2.28ข)$$

ค่าอนุพันธ์ย่อยต่าง ๆ สามารถใช้วิธีการแบ่งย่อยแบบตรงกลาง (central differencing scheme) เพื่อประมาณค่าดังนี้

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n = \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} \quad (2.29ก)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1}^n = \frac{\phi_i^n - \phi_{i-2}^n}{2\Delta x} \quad (2.29ข)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2}^n = \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_i^n}{\Delta x} \quad (2.29ค)$$

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i-1/2}^n = \frac{\phi_i^n - \phi_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (2.29ง)$$

เมื่อแทนค่าจากสมการ (2.28ก-ข) และสมการ (2.29ก-ง) ลงในสมการ (2.26) และจัดรูปใหม่จะได้

$$\begin{aligned} \phi_i^{n+1} = & \phi_i^n - \frac{u \Delta t}{\Delta x} \left\{ \left[ \phi_i^n + \frac{\Delta x}{2} \left( \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) - \frac{u \Delta t}{2} \left( \frac{\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n}{2\Delta x} \right) \right] \right. \\ & \left. - \left[ \phi_{i-1}^n + \frac{\Delta x}{2} \left( \frac{\phi_i^n - \phi_{i-2}^n}{2\Delta x} \right) - \frac{u \Delta t}{2} \left( \frac{\phi_i^n - \phi_{i-2}^n}{2\Delta x} \right) \right] \right\} \\ & + \frac{\varepsilon \Delta t}{(\Delta x)^2} [(\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) - (\phi_i^n - \phi_{i-1}^n)] \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$\begin{aligned} \phi_i^{n+1} = & \phi_i^n - \frac{1}{4} \left( \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right) (\phi_{i+1}^n + 3\phi_i^n - 5\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) + \frac{1}{4} \left( \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right)^2 (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n - \phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) \\ & + \frac{\varepsilon \Delta t}{(\Delta x)^2} (\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \end{aligned} \quad (2.31)$$

ทำการประมาณพจน์ต่าง ๆ ในสมการ (2.31) โดยการใช้อนุกรมเทย์เลอร์ กล่าวคือ

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n + (\Delta t) \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + \frac{(\Delta t)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} \quad (2.32ก)$$

$$\phi_{i+1}^n = \phi_i^n + (\Delta x) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \quad (2.32ข)$$

$$\phi_{i-1}^n = \phi_i^n - (\Delta x) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \quad (2.32ค)$$

$$\phi_{i-2}^n = \phi_i^n - (2\Delta x) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{(2\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{(2\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \quad (2.32ง)$$

เมื่อแทนค่าต่าง ๆ จากสมการ (2.32ก-ง) ลงในสมการ (2.31) และจัดรูปสมการใหม่ให้พจน์ทางซ้ายมือมีรูปแบบเช่นเดียวกันกับสมการเชิงอนุพันธ์ย่อย (2.25) จะได้

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( u\phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) &= -\frac{\Delta t}{2!} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{3!} \left( (\Delta t)^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} + \left( \frac{3}{2} u^2 (\Delta x \Delta t) - \frac{u}{2} (\Delta x)^2 \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \end{aligned} \quad (2.33)$$

พจน์แรกในวงเล็บทางขวามือของสมการหากใช้หลักการความสัมพันธ์ของตัวแปรบนแกนคุณลักษณะ พบว่า  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$  สมการ (2.33) จึงลดรูปลง ดังนี้

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( u\phi - \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = -\frac{1}{3!} \left( (\Delta t)^2 \frac{\partial^3 \phi}{\partial t^3} + \left( \frac{3}{2} u^2 (\Delta x \Delta t) - \frac{u}{2} (\Delta x)^2 \right) \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right) \quad (2.34)$$

ดังนั้นอันดับของความถูกต้องของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์คือ  $O(\Delta t^2, \Delta x \Delta t, \Delta x^2)$

ในทางปฏิบัติการหาคำนวณหาผลลัพธ์ของงานวิจัยนี้จะกระทำกับปัญหาในระนาบสองมิติ และเซลล์รูปทรงสามเหลี่ยมที่ใช้ในการคำนวณมีขนาดไม่สม่ำเสมอ นอกจากนี้ทิศทางของสนามความเร็วอาจจะไม่ได้ตั้งฉากกับพื้นผิวควบคุมของเซลล์สามเหลี่ยมซึ่งจะส่งผลให้อันดับของความถูกต้องจริงในการคำนวณลดลงจากอันดับของความถูกต้องที่ได้จากการวิเคราะห์ปัญหาใน 1 มิติ

## บทที่ 3

### ไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์

บทที่ 3 นี้จะอธิบายรายละเอียดขั้นตอนการคำนวณของไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้นมาเพื่อให้สอดคล้องกับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์เพื่อแก้ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาที่อยู่ในสถานะไม่คงตัวสองมิติดังที่ได้กล่าวมาแล้วในบทที่ 2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์ดังกล่าวมีชื่อว่า Finite Volume Element Method program หรือโปรแกรม FVEM ซึ่งเขียนขึ้นด้วยภาษาฟอร์แทรน (FORTRAN) ที่สามารถทำความเข้าใจได้ง่าย และสามารถทำงานได้บนเครื่องคอมพิวเตอร์ส่วนบุคคล (personal computer) ที่ใช้กันทั่วไปในปัจจุบันได้

#### 3.1 ลักษณะทั่วไปของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM

โปรแกรม FVEM ประกอบด้วยโปรแกรมหลัก (main program) โปรแกรมย่อย (subroutine) จำนวน 14 โปรแกรมและฟังก์ชัน (function) จำนวน 3 ฟังก์ชัน โดยชื่อของโปรแกรมย่อยและฟังก์ชันต่าง ๆ จะระบุอยู่ในวงเล็บสี่เหลี่ยม [...] และมีรายละเอียดขั้นตอนการทำงาน of โปรแกรม FVEM ดังนี้

3.1.1 เริ่มต้นการทำงานในโปรแกรมหลัก [MAIN] โดยเริ่มจากเรียกโปรแกรมย่อย [INPUT] สำหรับอ่านข้อมูลนำเข้าเบื้องต้นของปัญหา ได้แก่ จำนวนเซลล์และเวกเตอร์ของปัญหา จำนวนด้านที่อยู่บนขอบโดเมนของการไหล จำนวนครั้งสูงสุดในกระบวนการทำซ้ำและจำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณลงในไฟล์ส่งออก เงื่อนไขของการคำนวณ ได้แก่ เงื่อนไขการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์และเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง ค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา ค่าคุณสมบัติของปัญหา ได้แก่ ค่าสัมประสิทธิ์ของการพาและการเกิดปฏิกิริยา ปริมาณของแหล่งกำเนิด ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด (tolerance) เวลาสิ้นสุดการคำนวณ หมายเลขของเวกเตอร์ที่ประกอบขึ้นเป็นเซลล์ ค่าเริ่มต้นของตัวแปรสเกลาร์  $\phi$  และแหล่งกำเนิด ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของเวกเตอร์ หมายเลขของเวกเตอร์และเซลล์ที่อยู่บนขอบโดเมนของการไหล

3.1.2 เมื่ออ่านข้อมูลเบื้องต้นของปัญหาเสร็จแล้วจึงเริ่มคำนวณจำนวนเซลล์ที่ล้อมรอบเวกเตอร์แต่ละจุด และคำนวณค่าเบื้องต้นต่าง ๆ ที่จำเป็นในการคำนวณตัวแปรสเกลาร์ในช่วงเวลาถัดไป  $\phi^{n+1}$  โดยเรียกโปรแกรมย่อยตามลำดับ ดังนี้

3.1.2.1 โปรแกรมย่อย [GETGEO] เพื่อคำนวณหาพื้นที่ของเซลล์ ความยาวของด้านประกอบ ตำแหน่งโคออร์ดิเนตของจุดศูนย์กลางเซลล์ ทิศทางโคซายน์ของเวกเตอร์ที่ตั้งฉากกับด้านประกอบ หมายเลขของเซลล์ที่อยู่ติดกัน รวมทั้งระบุเซลล์ที่อยู่ในทิศทางต้นลม (upwind) และท้ายลม (downwind)

3.1.2.2 โปรแกรมย่อย [GETMAT] เพื่อคำนวณหาเมตริกซ์ผกผันของเมตริกซ์มวลแบบรวมตัวกันที่ตำแหน่งเวกเท็กซ์ โดยจะเรียกโปรแกรมย่อย [CRVEC] ในตอนเริ่มต้นการทำงานของโปรแกรมย่อยนี้

3.1.2.3 โปรแกรมย่อย [DTFIX] เพื่อคำนวณหาค่าช่วงเวลาวิกฤต (critical time step) ช่วงเวลาที่ใช้จริงในการคำนวณ และหาจำนวนรอบสูงสุดใหม่ในกรณีที่มีปัญหาที่ทำการคำนวณเป็นปัญหาในสภาวะไม่คงตัว

3.1.3 เริ่มต้นกระบวนการทำซ้ำโดยเรียกโปรแกรมย่อย [CRVEC] ในตอนเริ่มต้นของกระบวนการทำซ้ำนี้ทุกครั้งเพื่อกำหนดค่าเกรเดียนต์ในตอนเริ่มต้นให้เท่ากับศูนย์ จากนั้นจึงเริ่มคำนวณค่าต่าง ๆ โดยเรียกโปรแกรมย่อยตามลำดับ ดังนี้

3.1.3.1 โปรแกรมย่อย [GFEM] หรือโปรแกรมย่อย [GLSQ] เพื่อคำนวณหาค่าเกรเดียนต์ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์หรือระเบียบวิธีกำลังสองน้อยสุด (least-squares gradient reconstruction) โดยระหว่างการคำนวณจะเรียกโปรแกรมย่อย [BOUND] เพื่อประยุกต์เงื่อนไขขอบเขตของปัญหา

3.1.3.2 โปรแกรมย่อย [CONV] เพื่อคำนวณหาฟลักซ์ที่เกี่ยวข้องกับการพา โดยเรียกโปรแกรมย่อย [CRVEC] ในตอนเริ่มต้นการทำงานและระหว่างการคำนวณจะเรียกโปรแกรมย่อย [LIMIT] เพื่อกำกับค่าเกรเดียนต์ไม่ให้ฟลักซ์ที่เกี่ยวข้องกับการพามีค่าสูงเกินระดับ (overshoot) หรือมีค่าต่ำกว่าระดับ (undershoot)

3.1.3.3 โปรแกรมย่อย [DIFF] เพื่อคำนวณหาฟลักซ์ที่เกี่ยวข้องกับการแพร่ โดยเรียกโปรแกรมย่อย [CRVEC] ในตอนเริ่มต้นการทำงานและระหว่างการคำนวณจะเรียกโปรแกรมย่อย [GFEM] เพื่อคำนวณหาค่าเกรเดียนต์ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์

3.1.3.4 โปรแกรมย่อย [REAC] เพื่อคำนวณพจน์ที่เกี่ยวข้องกับการเกิดปฏิกิริยา โดยเรียกโปรแกรมย่อย [CRVEC] ในตอนเริ่มต้นการทำงาน

3.1.3.5 โปรแกรมย่อย [SOLV] เพื่อแก้ระบบสมการและคำนวณหาปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่ช่วงเวลาถัดไป

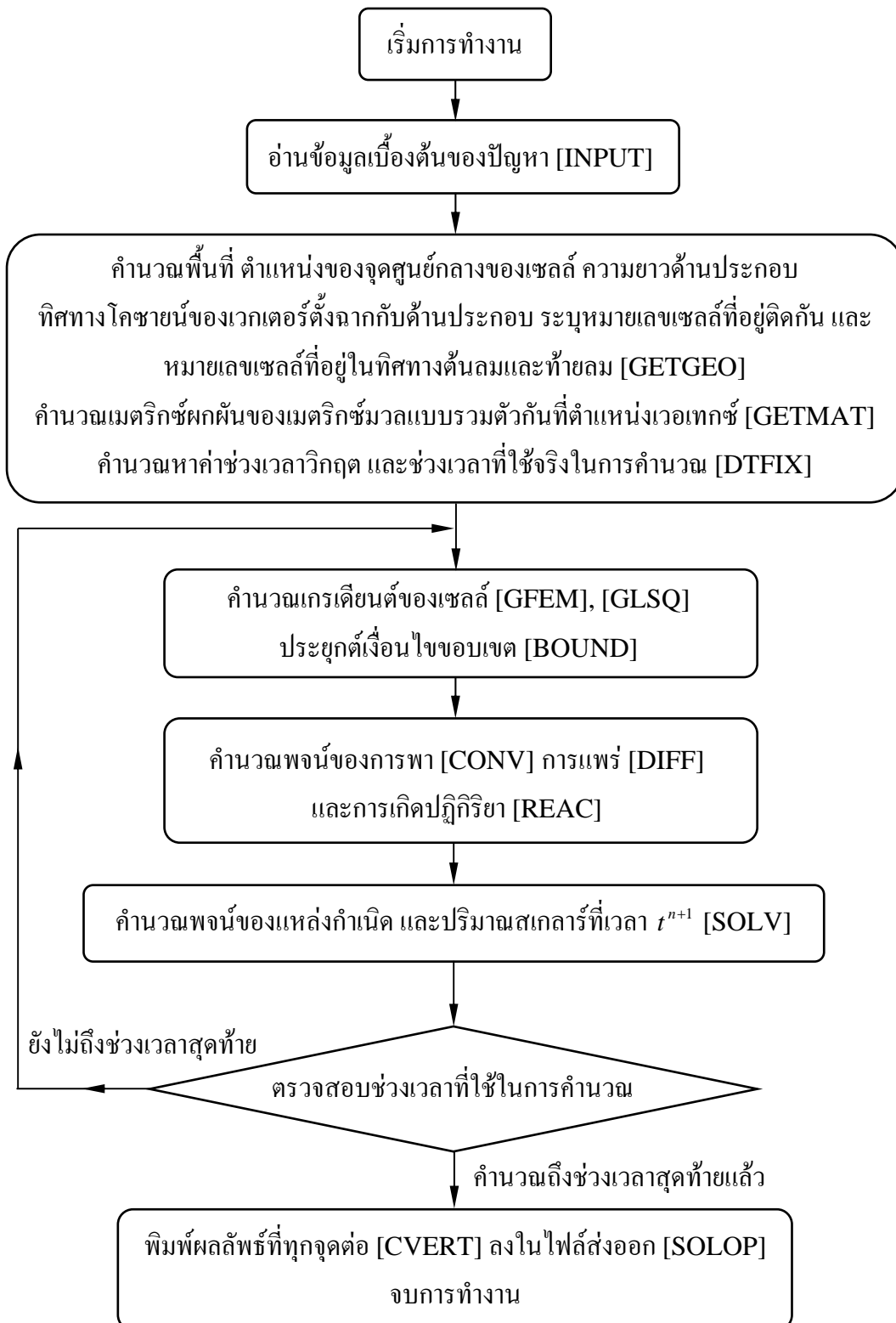


3.1.4 ตรวจสอบการลู่เข้าของผลลัพธ์ โดยหาค่าการเปลี่ยนแปลงของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่ได้จากการคำนวณในข้อ 3.1.3.5 กับค่าเดิมก่อนการคำนวณจากทุกเซลล์และเลือกใช้ค่าที่มากที่สุดเป็นตัวกำหนดการลู่เข้าของผลลัพธ์ หากค่าเปลี่ยนแปลงนั้นมีค่าน้อยกว่าค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด (tolerance) ที่กำหนดให้ จะดำเนินการต่อไปในข้อ 3.1.5 แต่หากค่าดังกล่าวยังคงมากกว่าค่าที่กำหนดให้ก็ให้วนย้อนกลับไปทำการคำนวณซ้ำใหม่ในหัวข้อ 3.1.3 ข้างต้น กระบวนการทำซ้ำเช่นนี้จะทำเรื่อยไปจนกว่าค่าการเปลี่ยนแปลงนั้นน้อยกว่าค่าที่กำหนดให้หรือได้ทำซ้ำจนครบจำนวนรอบสูงสุดแล้ว

3.1.5 แสดงผลลัพธ์จากการคำนวณ โดยเรียกโปรแกรมย่อย [CVERT] เพื่อแปลงค่าปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่คำนวณได้ที่จุดศูนย์กลางของเซลล์ไปยังตำแหน่งเวกเตอร์ และบันทึกผลลัพธ์ลงในไฟล์ส่งออกที่ต้องการเพื่อนำไปใช้แสดงผลทางด้านกราฟิกต่อไป ไฟล์ข้อมูลส่งออกจะถูกเรียกโดยโปรแกรมย่อย [SOLOP] ซึ่งผลลัพธ์ที่คำนวณได้ดังกล่าวประกอบด้วย จำนวนรอบและเวลาที่ใช้จริงในการคำนวณ ค่าช่วงเวลาวิกฤต และค่าปริมาณสเกลาร์  $\phi$

3.1.6 ฟังก์ชันอื่น ๆ ได้แก่ฟังก์ชัน [UVEL], [VVEL] เป็นฟังก์ชันเพื่อคำนวณหาปริมาณความเร็วในทิศแกน  $x$  และแกน  $y$  ของสนามความเร็ว (velocity field) และฟังก์ชัน [BC] เป็นฟังก์ชันเพื่อคำนวณหาค่าที่กำหนดให้ที่ขอบโดเมนของปัญหา การคำนวณฟังก์ชันเหล่านี้จะแตกต่างกันไปตามลักษณะของปัญหาที่ทำการวิเคราะห์ โดยจะแทรกไว้ในโปรแกรมย่อยบางโปรแกรมที่ต้องการเรียกใช้ค่าเหล่านี้

รายละเอียดของไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM ได้แสดงไว้ในภาคผนวก ก. โดยได้สรุปขั้นตอนการทำงานของโปรแกรม FVEM ไว้ในรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 ขั้นตอนการทำงานของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM

### 3.2 รายละเอียดของไฟล์ข้อมูลนำเข้าที่ใช้กับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM

ลักษณะของไฟล์ข้อมูลนำเข้าที่จะนำมาใช้กับ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM ประกอบด้วย 5 ส่วนย่อย ดังต่อไปนี้

#### ส่วนที่ 1 ขนาดของปัญหา ข้อกำหนด และเงื่อนไขในการคำนวณ

บรรทัดแรก      คำระบุถึงจำนวนเซลล์ จำนวนเวอเทกซ์ จำนวนด้านที่อยู่บนขอบของโดเมนการคำนวณ จำนวนครั้งสูงสุดของการทำซ้ำ จำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณ คำระบุประเภทของเงื่อนไขการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ และเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง

บรรทัดที่สอง      จำนวนเซลล์ จำนวนเวอเทกซ์ จำนวนด้านที่อยู่บนขอบของโดเมนการคำนวณ จำนวนครั้งสูงสุดของการทำซ้ำ จำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ และเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง

ตัวอย่างเช่น:    nvol    npoi    nbou    nstep    nwrt    iwrt    ilim    iopt  
                   884    483        80    500        10        0        0        10

หมายเหตุ: (1) ตัวเลขแสดงเงื่อนไขของการบันทึกผลการคำนวณ กำหนดโดย  
 iwrt = 0 หมายถึงบันทึกผลการคำนวณครั้งสุดท้ายลงในไฟล์ข้อมูลส่งออก  
 iwrt = 1 หมายถึงบันทึกผลการคำนวณทุก ๆ ครั้งที่กำหนดโดยจำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณ (nwrt) ลงในไฟล์ข้อมูลส่งออก

(2) ตัวเลขแสดงเงื่อนไขของการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์  
 ilim = 0 หมายถึงกำหนดให้ไม่ใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ในการกำกับค่าเกรเดียนต์  
 ilim = 1 หมายถึงกำหนดให้ใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ในการกำกับค่าเกรเดียนต์

(3) ตัวเลขแสดงเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง  
 iopt = 10 หมายถึงคำนวณหาผลลัพธ์โดยใช้ระเบียบวิธีอันดับหนึ่ง  
 iopt = 20 หมายถึงคำนวณหาผลลัพธ์โดยใช้ระเบียบวิธีอันดับสองและคำนวณหา  
 ค่าเกรเดียนต์ด้วยวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์  
 iopt = 21 หมายถึงคำนวณหาผลลัพธ์โดยใช้ระเบียบวิธีอันดับสองและคำนวณหา  
 ค่าเกรเดียนต์ด้วยวิธีกำลังสองน้อยสุด

**ส่วนที่ 2** ค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา คุณสมบัติของปัญหา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ

บรรทัดแรก      คำระบุถึงค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา ค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่ ค่าสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ

บรรทัดที่สอง    ค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา ค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่ ค่าสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ

ตัวอย่างเช่น:    cfl                    eps                    k                    toler                    time  
                   1.00            0.00E+00            0.00E+00            0.10E-05            0.40E+01

**ส่วนที่ 3** ข้อมูลของเอลิเมนต์ และข้อมูลเริ่มต้นของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  และปริมาณแหล่งกำเนิด

บรรทัดแรก      คำระบุความหมายของการเชื่อมต่อของเวอร์ทกซ์บนเซลล์และข้อมูลเริ่มต้น และจำนวนเซลล์ซึ่งอยู่ในวงเล็บสี่เหลี่ยม [...]

บรรทัดที่สอง    คำระบุถึงค่าหมายเลขของเซลล์ เวอร์ทกซ์ตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 คำระบุถึงข้อมูลเริ่มต้นของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  และปริมาณแหล่งกำเนิด

บรรทัดต่อ ๆ ไป    หมายเลขของเซลล์ เวอร์ทกซ์ตำแหน่งที่ 1, 2 และ 3 ค่าเริ่มต้นของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  และปริมาณแหล่งกำเนิด

ตัวอย่างเช่น:    Volume Vertices Connection and Initial Conditions[ 8192]:  
                   Vol            p1            p2            p3            initial value            Q  
                   1            80            1            5            0.953291E+00            0.000000E+00  
                   2            61            4            62            -0.961595E+00            0.000000E+00  
                   3            2            24            23            0.959002E+00            0.000000E+00  
                   .            .            .            .            .            .  
                   .            .            .            .            .            .  
                   882            26            195            228            0.881321E+00            0.000000E+00  
                   883            64            161            194            -0.881584E+00            0.000000E+00  
                   884            45            178            211            -0.958611E+00            0.000000E+00

**ส่วนที่ 4** ข้อมูลของตำแหน่งเวอร์ทกซ์

บรรทัดแรก      คำระบุความหมายของตำแหน่งเวอร์ทกซ์ และจำนวนเวอร์ทกซ์ซึ่งอยู่ในวงเล็บสี่เหลี่ยม [...]

บรรทัดที่สอง    คำระบุถึงค่าหมายเลขเวอร์ทกซ์ และคำระบุตำแหน่งโคออร์ดิเนตบนแกน  $x$  และแกน  $y$  ของเวอร์ทกซ์นั้นตามลำดับ

บรรทัดต่อ ๆ ไป หมายเลขเวกเตอร์ และตำแหน่งโคออร์ดิเนตบนแกน  $x$  และแกน  $y$  ของเวกเตอร์นั้นตามลำดับ

ตัวอย่างเช่น: Volume Vertices Coordinates[ 483]:

point	x-coordinates	y-coordinates
1	-0.400000E+01	-0.400000E+01
2	0.400000E+01	-0.400000E+01
3	0.400000E+01	0.400000E+01
.	.	.
.	.	.
.	.	.
481	0.196911E+00	-0.265284E+01
482	-0.163824E+00	-0.289885E+01
483	-0.524876E+00	-0.298916E+01

### ส่วนที่ 5 ข้อมูลของเซลล์ที่อยู่บนขอบโดเมนของปัญหา

บรรทัดแรก คำระบุความหมายของขอบเขต และจำนวนด้านที่อยู่บนขอบโดเมนระบอบอยู่ภายในวงเล็บสี่เหลี่ยม [...]

บรรทัดที่สอง คำระบุถึงค่าหมายเลขเวกเตอร์ หมายเลขเซลล์ และคำระบุถึงประเภทของขอบเขต

บรรทัดต่อ ๆ ไป หมายเลขเวกเตอร์ หมายเลขเซลล์ และหมายเลขที่กำหนดประเภทของขอบเขตนั้น

ตัวอย่างเช่น: Boundary Sides [ 80]:

p1	p2	volume	type
1	5	1	0
5	6	299	0
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
79	80	39	0
80	1	1	0

หมายเหตุ: ตัวเลขแสดงเงื่อนไขของขอบเขต กำหนดโดย

$\text{bound}(4, \text{nboun}) = 0$  หมายถึงขอบเขตที่ไม่ได้กำหนดค่าตัวแปร  $\phi$

$\text{bound}(4, \text{nboun}) = 1$  หมายถึงขอบเขตที่กำหนดค่าตัวแปร  $\phi$

### 3.3 รายละเอียดของไฟล์ข้อมูลส่งออกที่ใช้กับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM

หลังจากโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM ได้ทำการคำนวณสิ้นสุดลงแล้ว โปรแกรมจะบันทึกผลการคำนวณลงในไฟล์ข้อมูลส่งออก โดยมีรายละเอียดประกอบด้วย 3 ส่วนย่อย ดังนี้

ส่วนที่ 1 ขนาดของปัญหา ข้อกำหนด และเงื่อนไขในการคำนวณ

บรรทัดแรก	คำระบุถึงจำนวนเซลล์ จำนวนเวอเทกซ์ จำนวนด้านที่อยู่บนขอบของโดเมนการคำนวณ จำนวนครั้งสูงสุดของการทำซ้ำ จำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณ คำระบุประเภทของเงื่อนไขการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ และเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง
บรรทัดที่สอง	จำนวนเซลล์ จำนวนเวอเทกซ์ จำนวนด้านที่อยู่บนขอบของโดเมนการคำนวณ จำนวนครั้งสูงสุดของการทำซ้ำ จำนวนครั้งของการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขของการบันทึกผลการคำนวณ เงื่อนไขการใช้ขีดจำกัดฟลักซ์ และเงื่อนไขการเลือกคำนวณอันดับความถูกต้อง

**ส่วนที่ 2** ค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา คุณสมบัติของปัญหา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ

บรรทัดแรก	คำระบุถึงค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา ค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่ ค่าสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ
บรรทัดที่สอง	ค่าตัวประกอบของการใช้ช่วงเวลา ค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่ ค่าสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยา ค่าการเปลี่ยนแปลงน้อยที่สุด และเวลาสิ้นสุดการคำนวณ

**ส่วนที่ 3** ข้อมูลผลการคำนวณซึ่งระบุบนตำแหน่งเวอเทกซ์

บรรทัดแรก	คำระบุถึงค่าหมายเลขเวอเทกซ์ คำระบุตำแหน่งโคออร์ดิเนตบนแกน $x$ และแกน $y$ และผลการคำนวณที่ตำแหน่งเวอเทกซ์นั้น
บรรทัดต่อ ๆ ไป	หมายเลขเวอเทกซ์ และตำแหน่งโคออร์ดิเนตบนแกน $x$ และแกน $y$ และผลการคำนวณที่ตำแหน่งเวอเทกซ์นั้น

ตัวอย่างเช่น:

nvol	npoi	nbou	nstep	nwrt	iwrt	ilim	iopt
884	483	80	500	10	0	0	10
cfl	eps		k	toler		time	
1.00	0.00E+00	0.00E+00	0.10E-05	0.40E+01			
Point	x-coordinates		y-coordinates		solution		
1	-0.400000E+01		-0.400000E+01		0.953283E+00		
2	0.400000E+01		-0.400000E+01		0.959006E+00		
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
482	-0.163824E+00		-0.289885E+01		0.890628E+00		
483	-0.524876E+00		-0.298916E+01		0.898051E+00		

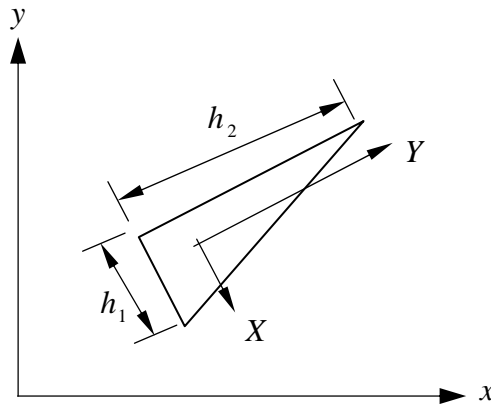
## บทที่ 4

### เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

ในการวิเคราะห์ปัญหาที่ต้องการความถูกต้องของผลลัพธ์สูงจำเป็นต้องใช้เซลล์ที่มีขนาดเล็กจำนวนมากในการจำลองรูปร่างของปัญหา โดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงหรือบริเวณที่เกิดความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์ซึ่งลักษณะของผลลัพธ์เช่นนี้สามารถพบได้ทั่วไปในปัญหาที่มีอิทธิพลของการพาเป็นส่วนประกอบหลัก และหากปัญหาเหล่านี้มีสนามความเร็วที่มีความซับซ้อนจะทำให้ไม่สามารถประเมินลักษณะการกระจายตัวของผลลัพธ์ล่วงหน้าก่อนที่จะทำการวิเคราะห์ได้ การเลือกใช้เซลล์ที่มีขนาดเล็กทั่วทั้งโดเมนของปัญหาจะทำให้ได้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องมากขึ้นแต่จะใช้เวลาในการคำนวณรวมถึงสิ้นเปลืองหน่วยความจำบนเครื่องคอมพิวเตอร์โดยไม่จำเป็น เป็นผลให้การวิเคราะห์ปัญหาที่มีขนาดใหญ่หรือมีความซับซ้อนทำได้ลำบากเนื่องจากขีดจำกัดของเครื่องคอมพิวเตอร์ ในบทนี้จึงนำเสนอการผนวกเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์เพื่อช่วยให้สามารถกำหนดขนาดเซลล์ที่เหมาะสมในบริเวณที่ต้องการก่อนทำการวิเคราะห์ได้

#### 4.1 หลักการของเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

หลักการเบื้องต้นของเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติคือการนำผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์และข้อมูลเบื้องต้นของปัญหามากำหนดขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมในการคำนวณครั้งต่อไป โดยกำหนดให้มีเซลล์ขนาดเล็กในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูง และให้มีเซลล์ขนาดใหญ่ในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์ต่ำ รูปที่ 4.1 แสดงแนวคิดสำหรับขนาดของเซลล์ที่เหมาะสม สมมติว่าภายในเซลล์ที่กำลังพิจารณาอยู่นี้มีอัตราการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์ในแนวแกนหลัก  $X$  มากกว่าในแนวแกนหลัก  $Y$  ดังนั้นเซลล์ที่กำลังพิจารณาจึงควรมีขนาดของเซลล์  $h_1$  ในแนวแกนหลัก  $X$  สั้นกว่าขนาดของเซลล์  $h_2$  ในแนวแกนหลัก  $Y$  เพื่อให้ผลลัพธ์ในแนวแกนหลัก  $X$  ที่คำนวณได้มีความถูกต้องสูง ดังนั้นจึงจำเป็นต้องคำนวณหาทิศทางแกนหลัก  $X$  และแกนหลัก  $Y$  รวมทั้งหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมในแนวแกนทั้งสอง



รูปที่ 4.1 ขนาดของเซลล์ในแนวแกนหลัก X และ Y

การคำนวณหาทิศทางแกนหลักดังกล่าวอาศัยหลักการของการหาความเค้นในแนวแกนหลัก (principal stress) ในวิชากลศาสตร์ของแข็ง (solid mechanics) ที่ว่าสำหรับความเค้นในสองมิติใด ๆ ซึ่งประกอบด้วยความเค้นตั้งฉาก  $\tau_{xx}, \tau_{yy}$  และความเค้นเฉือน  $\tau_{xy}$  จะมีแนวแกนหลักซึ่งสามารถลดรูปความเค้นให้เหลือเพียงความเค้นตั้งฉากในแนวแกนหลักทั้งสองคือ  $\tau_{XX}, \tau_{YY}$  ได้

หลักการดังกล่าวเมื่อนำมาใช้กับเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติสำหรับงานวิจัยนี้ตัวบ่งชี้อัตราการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์คือปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ดังนั้นจึงแทนค่าความเค้นด้วยค่าอนุพันธ์อันดับสองของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ได้แก่  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$  และ  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}$  ค่าอนุพันธ์อันดับสองทั้งสามค่าจะถูกนำมาคำนวณหาค่าในแนวแกนหลักจากสมการ

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) + \sqrt{\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right)^2} \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) - \sqrt{\left( \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \right)^2 + \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right)^2} \quad (4.2)$$

กระบวนการดังกล่าวจะถูกคำนวณทุก ๆ ตำแหน่งเวกเตอร์ที่อยู่ภายในแบบจำลองไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ จากนั้นจึงนำค่า  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2}$  และ  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2}$  ที่ทุก ๆ ตำแหน่งมาเปรียบเทียบกันเพื่อหาค่าอนุพันธ์อันดับสองที่มากที่สุดของปัญหาซึ่งแทนด้วยสัญลักษณ์  $\lambda_{\max}$  กล่าวคือ

$$\lambda_{\max} = \max \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2}, \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right) \quad (4.3)$$



ค่า  $\lambda_{\max}$  ที่คำนวณได้จะถูกนำไปใช้คำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมตามตำแหน่งต่าง ๆ ดังนี้

$$h_1^2 \left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} \right| = h_2^2 \left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \right| = h_{\min}^2 \lambda_{\max} \quad (4.4)$$

โดยที่  $h_1$  คือขนาดของเซลล์ในแนวแกนหลัก  $X$  และ  $h_2$  คือขนาดของเซลล์ในแนวแกนหลัก  $Y$  ดังนั้นหากทำการกำหนดขนาดของเซลล์ที่เล็กที่สุด  $h_{\min}$  แล้วจะสามารถคำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสม  $h_1$  และ  $h_2$  ได้

สมการ(4.4) บ่งบอกถึงการกำหนดขนาดของเซลล์ที่เล็กที่สุด  $h_{\min}$  มีความสำคัญอย่างยิ่งในการปรับขนาดเมช กล่าวคือหากกำหนดค่า  $h_{\min}$  น้อยเกินไปจะทำให้เซลล์สามเหลี่ยมจำนวนมากเกินไปในทางกลับกันหากกำหนดค่า  $h_{\min}$  มากเกินไปก็จะมีจำนวนเซลล์สามเหลี่ยมน้อยเกินไปซึ่งอาจส่งผลกระทบต่อความแม่นยำในการคำนวณหาผลลัพธ์ ดังนั้นการเลือกค่าที่เหมาะสมจึงเป็นสิ่งที่สำคัญมาก ในทางปฏิบัติยังไม่มีวิธีใดที่สามารถบอกได้ว่าค่า  $h_{\min}$  ที่เหมาะสมควรมีค่าเท่าใดทั้งนี้ขึ้นกับลักษณะของปัญหาและประสบการณ์ของผู้ทำการวิเคราะห์

ค่าอนุพันธ์อันดับสองของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่ตำแหน่งเวกเตอร์ต่าง ๆ สามารถคำนวณได้ด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ตามขั้นตอนดังต่อไปนี้ ยกตัวอย่างหากต้องการคำนวณหา  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2}$  ดังนั้นเซลล์สามเหลี่ยมจะถูกสมมติให้มีการกระจายปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ไปบนเซลล์เป็นแบบเชิงเส้น กล่าวคือ

$$\phi_{(vol)} = [N] \{ \phi \} \quad (4.5)$$

ดังนั้น

$$\frac{\partial \phi_{(vol)}}{\partial x} = \left[ \frac{\partial N}{\partial x} \right] \{ \phi \} \quad (4.6)$$

ซึ่งมีค่าคงที่และรู้ค่าบนเซลล์นั้น ในขณะที่เดียวกันหากมองโดเมนในภาพรวมและสมมติว่าค่าเกรเดียนต์ของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  มีลักษณะการกระจายแบบแผ่นเรียบซึ่งขึ้นอยู่กับค่าเกรเดียนต์ที่เวกเตอร์ของเซลล์ ดังนี้

$$\frac{\partial \hat{\phi}_{(vol)}}{\partial x} = [N] \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} \quad (4.7)$$

โดยที่  $\frac{\partial \hat{\phi}_{(vol)}}{\partial x}$  หมายถึงปริมาณเกรเดียนต์ของตัวแปร  $\phi$  บนโดเมนของการคำนวณ จากนั้นนำสมการ (4.6) ลบออกจากสมการ (4.7) แล้วประยุกต์ระเบียบวิธีถ่วงน้ำหนักเศษตกค้างจะได้

$$\int_A \{N\} \left( \frac{\partial \hat{\phi}_{(vol)}}{\partial x} - \frac{\partial \phi_{(vol)}}{\partial x} \right) dA = 0 \quad (4.8)$$

แทนค่าสมการ (4.7) ลงในสมการ (4.8) จะได้

$$\int_A \{N\} [N] dA \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} = \int_A \{N\} dA \frac{\partial \phi_{(vol)}}{\partial x} \quad (4.9)$$

$$[M] \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} = \int_A \{N\} dA \frac{\partial \phi_{(vol)}}{\partial x} \quad (4.10)$$

โดยที่  $[M]$  คือเมตริกซ์มวลแบบนัย สมการ (4.10) เป็นสมการของเซลล์แต่ละเซลล์ดังนั้นก็จำเป็นต้องทำการคำนวณสำหรับทุก ๆ เซลล์แล้วรวมขึ้นเป็นระบบสมการรวมใหญ่เพื่อหาค่าเกรเดียนต์ของปริมาณ  $\phi$  ที่ตำแหน่งเวกเตอร์ อนึ่งระบบสมการรวมใหญ่สามารถทำการแก้ระบบสมการได้โดยง่ายหากแปลงเมตริกซ์มวลแบบนัยให้อยู่ในรูปของเมตริกซ์มวลแบบรวมตัวกันที่ตำแหน่งเวกเตอร์ดังสมการ (2.22)

การคำนวณหาค่าอนุพันธ์อันดับสองสามารถดำเนินไปในแนวทางเดียวกัน กล่าวคือ หลังจากทราบค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งที่ตำแหน่งเวกเตอร์แล้วสามารถคำนวณหาค่าอนุพันธ์อันดับสองได้จาก

$$\frac{\partial^2 \phi_{(vol)}}{\partial x^2} = \left[ \frac{\partial N}{\partial x} \right] \left\{ \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} \quad (4.11)$$

สมมติว่าค่าอนุพันธ์อันดับสองของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  บนเซลล์นั้นมีลักษณะการกระจายแบบเชิงเส้นซึ่งขึ้นอยู่กับค่าอนุพันธ์อันดับสองที่เวกเตอร์ของเซลล์ ดังนี้

$$\frac{\partial^2 \hat{\phi}_{(vol)}}{\partial x^2} = [N] \left\{ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right\} \quad (4.12)$$

ดังนั้นค่าอนุพันธ์อันดับสองของปริมาณ  $\phi$  ที่ตำแหน่งเวกเตอร์จะสามารถคำนวณได้จาก

$$\int_A \{N\} [N] dA \left\{ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right\} = \int_A \{N\} dA \frac{\partial^2 \phi_{(vol)}}{\partial x^2} \quad (4.13)$$

$$[M] \left\{ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right\} = \int_A \{N\} dA \frac{\partial^2 \phi_{(vol)}}{\partial x^2} \quad (4.14)$$

สำหรับขั้นตอนในการหาค่า  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}$  และ  $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y}$  สามารถคำนวณได้ในทำนองเดียวกัน

#### 4.2 โปรแกรมคอมพิวเตอร์สำหรับการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

การประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์ โปรแกรมคอมพิวเตอร์เพื่อวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาที่อยู่ในสถานะไม่คงตัว สองมิตินี้จะมีโปรแกรมสำคัญที่เกี่ยวข้องจำนวน 2 โปรแกรมคือ โปรแกรม FVEM และ โปรแกรม FEMESH โดยที่โปรแกรม FEMESH ซึ่งได้ถูกพัฒนาขึ้นโดย รศ. ดร. สุทธิศักดิ์ พงษ์ธนาพาณิชย์ จะทำหน้าที่สร้างแบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์ หาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสม และแสดงผลทางด้านกราฟิก การทำงานร่วมกันระหว่างโปรแกรม FVEM และ โปรแกรม FEMESH จำเป็นต้องอาศัยโปรแกรมแปลงข้อมูลให้อยู่ในรูปของข้อมูลนำเข้าที่สามารถใช้ได้กับ โปรแกรมหลักดังกล่าว นั่นคือ โปรแกรม FEM\_FVE และ โปรแกรม FVE\_FEM โดยมีรายละเอียดของโปรแกรมตามลำดับขั้นตอนการทำงานดังนี้

(1) โปรแกรม FEMESH เป็นโปรแกรมสำหรับวิเคราะห์ปัญหาทางด้านไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์ต่าง ๆ ในงานวิจัยนี้จะใช้โปรแกรม FEMESH ในการสร้างแบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์และแสดงผลลัพธ์ในรูปของกราฟิก ตลอดจนคำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมในขั้นตอนของการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

(2) โปรแกรม FEM\_FVE เป็นโปรแกรมสำหรับอ่านข้อมูลเบื้องต้นของปัญหาที่ได้จากโปรแกรม FEMESH แล้วทำการแปลงข้อมูลเหล่านี้เพื่อให้อยู่ในรูปของไฟล์ข้อมูลนำเข้าสำหรับใช้ในโปรแกรม FVEM ลักษณะของไฟล์ข้อมูลนำเข้ามีรายละเอียดดังที่ได้กล่าวมาแล้วในหัวข้อ 3.2 และรายละเอียดของโปรแกรม FEM\_FVE แสดงไว้ในภาคผนวก ข.

(3) โปรแกรม FVEM เป็นโปรแกรมสำหรับวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาที่อยู่ในสถานะไม่คงตัวสองมิติ ผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์นี้ได้อธิบายรายละเอียดอยู่ในหัวข้อ 3.3

(4) โปรแกรม FVE\_FEM เป็นโปรแกรมสำหรับแปลงผลลัพธ์ที่ได้จากโปรแกรม FVEM เพื่อให้อยู่ในรูปของไฟล์ข้อมูลนำเข้าสำหรับใช้ในโปรแกรม FEMESH โดยมีรายละเอียดแสดงไว้ในภาคผนวก ค.

### 4.3 ขั้นตอนการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

ขั้นตอนในการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์เพื่อวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาสามารถแสดงได้ดังรูปที่ 4.2 โดยมีรายละเอียดของขั้นตอนแต่ละขั้นตอน ดังต่อไปนี้

**ขั้นตอนที่ 1** ใช้โปรแกรม FEMESH สร้างโดเมนของปัญหาและสร้างแบบจำลองไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์ที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอทั่วทั้งโดเมนของปัญหา จากนั้นจึงกำหนดเงื่อนไขขอบเขตของปัญหา

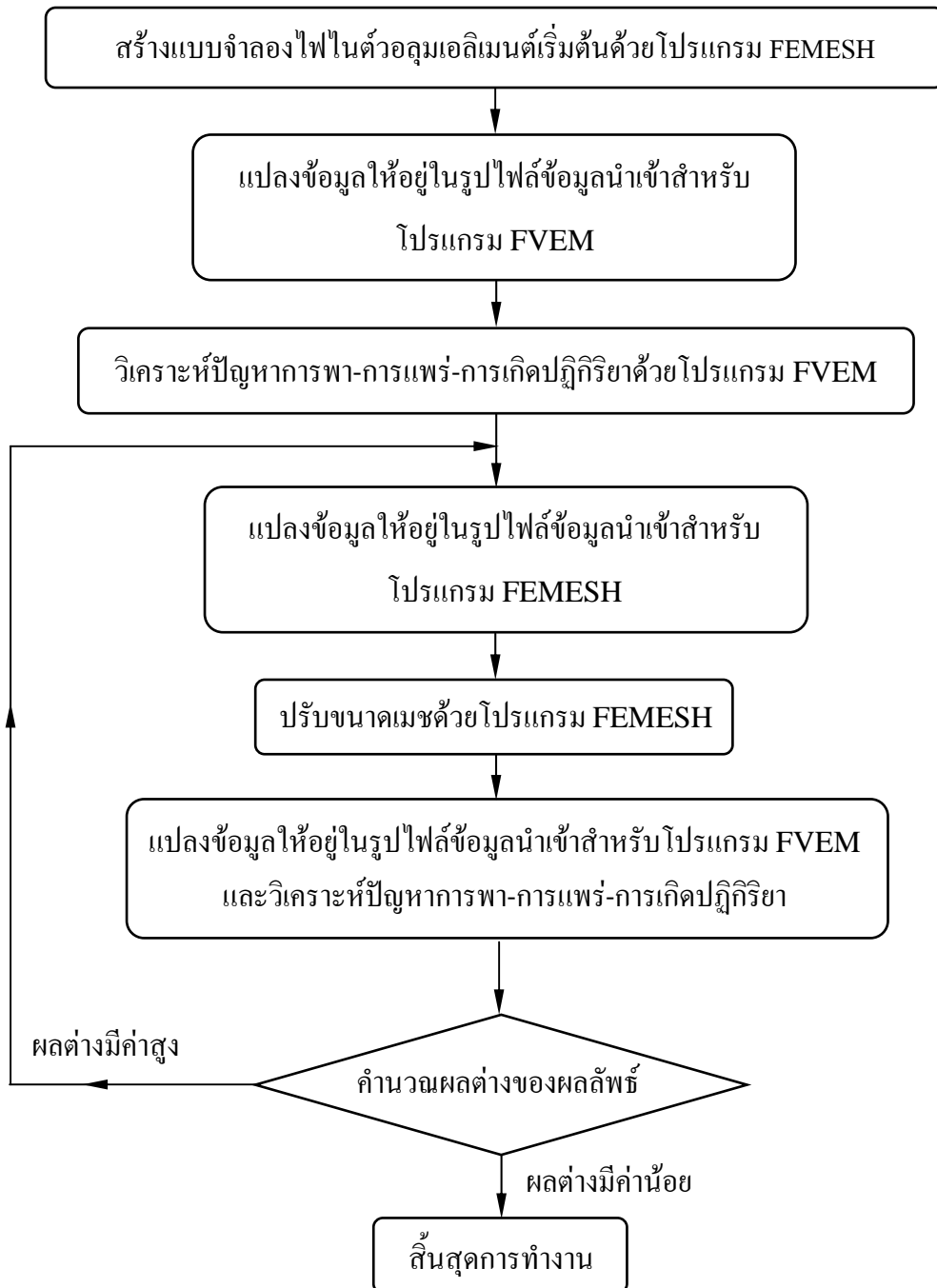
**ขั้นตอนที่ 2** ใช้โปรแกรม FEM\_FVE อ่านข้อมูลเบื้องต้นของปัญหาที่ได้จากโปรแกรม FEMESH ในขั้นตอนที่ 1 แล้วจึงแปลงข้อมูลเหล่านี้ให้อยู่ในรูปของไฟล์ข้อมูลนำเข้าที่สามารถใช้กับโปรแกรม FVEM ได้พร้อมทั้งกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้นของปัญหา

**ขั้นตอนที่ 3** ใช้โปรแกรม FVEM วิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาดังที่ได้กล่าวมาแล้วในบทที่ 3

**ขั้นตอนที่ 4** ใช้โปรแกรม FVE\_FEM นำผลลัพธ์ที่ได้จากขั้นตอนที่ 3 แปลงเป็นข้อมูลนำเข้าสำหรับใช้ในโปรแกรม FEMESH

**ขั้นตอนที่ 5** ใช้โปรแกรม FEMESH เพื่อแสดงผลลัพธ์ในรูปของกราฟิกและทำการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ ในขั้นตอนนี้ผู้ใช้โปรแกรมจะทำการกำหนดขนาดของเซลล์ที่มีขนาดใหญ่ที่สุดและเล็กที่สุด หลังจากที่ได้รูปแบบจำลองไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์ใหม่แล้วจึงทำการกำหนดเงื่อนไขขอบเขตบนแบบจำลองที่ได้

**ขั้นตอนที่ 6** ทำขั้นตอนที่ 2 และขั้นตอนที่ 3 ซ้ำอีกครั้ง เปรียบเทียบผลลัพธ์ครั้งใหม่กับผลลัพธ์ในครั้งก่อนหากพบว่าผลต่างระหว่างผลลัพธ์ทั้งสองครั้งมีค่าสูงแสดงว่าขนาดของเซลล์ที่ทำการปรับยังมีขนาดไม่เหมาะสม จะต้องนำผลลัพธ์ในครั้งหลังนี้ไปทำการปรับขนาดซ้ำใหม่ในขั้นตอนที่ 4 และ 5 ตามลำดับ กระบวนการทำซ้ำเช่นนี้จะทำเรื่อยไปจนกว่าผลต่างระหว่างผลลัพธ์มีค่าน้อยมากหรือมีค่าเป็นศูนย์



รูปที่ 4.2 ลำดับขั้นตอนการประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

#### 4.4 ลักษณะของไฟล์ข้อมูลนำเข้าสำหรับโปรแกรม FEMESH

ลักษณะของไฟล์ข้อมูลนำเข้าสำหรับโปรแกรม FEMESH เพื่อใช้สำหรับการปรับขนาดเมช มีรายละเอียดแบ่งได้ 2 ส่วน ประกอบด้วย

**ส่วนที่ 1** ส่วนคำสั่ง (command section) ประกอบด้วยข้อมูลต่าง ๆ ที่จำเป็นในการตรวจสอบความสอดคล้องกันระหว่างไฟล์ข้อมูลนำเข้ากับรูปแบบไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์ที่สร้างขึ้น ดังตัวอย่างส่วนคำสั่งของไฟล์ 'square00.out' ในรูปที่ 4.3

```

OUT_FILE_VERSION=1.0
TITLE=FVE MODEL FOR ANALYSIS SQUARE PULSE FLOW
SUBTITLE=
DATE=03-SEP-2552 13:38:27
SOL=17
SOLVER_ID=0
PROBLEMID=32118089
SOLVERSTART=03-Sep-09 13:38:28
SOLVEREND=03-Sep-09 13:38:28
BANDWIDTH=0
REMESH_HMIN=0.155435
REMESH_HMAX=0.572233
END=CMD

```

รูปที่ 4.3 ส่วนคำสั่งของไฟล์ 'square00.out'

**ส่วนที่ 2** ส่วนผลลัพธ์ (solution section) ประกอบด้วยค่าระบุความหมายของผลลัพธ์ที่ตำแหน่งเวกเตอร์โดยในโปรแกรมนี้จะใช้คำว่า node และจำนวนเวกเตอร์ซึ่งอยู่ภายในวงเล็บสี่เหลี่ยม [...] บรรทัดต่อ ๆ ไปประกอบด้วยค่าผลลัพธ์ที่คำนวณได้ที่ตำแหน่งเวกเตอร์ ได้แก่ หมายเลขเวกเตอร์ ค่าของปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ซึ่งในโปรแกรมนี้จะใช้แทนด้วยค่าความเร็วในแนวแกนทั้งสอง ค่าความดัน และขนาดของเซลล์ ดังตัวอย่างส่วนผลลัพธ์ของไฟล์ 'square00.out' ในรูปที่ 4.4

```

NODAL VALUES SOLUTIONS [ 2115]:

```

NODE	U	V	P	H
1	0.000000E+00	0.100000E+01	0.000000E+00	0.373623E-01
2	0.000000E+00	0.100000E+01	0.697046E+01	0.334475E-01
3	0.000000E+00	0.100000E+01	0.123201E+02	0.255858E-01
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
2113	-0.365409E-04	0.129184E+00	0.769451E+01	0.388770E-01
2114	-0.115609E+00	0.799870E-01	0.471185E+01	0.388770E-01
2115	-0.957387E-02	0.552366E-01	0.146448E+01	0.388770E-01

รูปที่ 4.4 ส่วนผลลัพธ์ของไฟล์ 'square00.out'

## บทที่ 5

### การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรม FVEM และการวิเคราะห์ปัญหา โดยใช้เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

ในบทนี้จะนำเสนอการใช้ไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM มาวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสถานะไม่อยู่ตัว โดยจะวิเคราะห์ปัญหาเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำ และเปรียบเทียบกับวิธีผลต่างอัปวินด์ (upwind differencing scheme; UDS) ซึ่งเป็นระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มวิธีหนึ่ง หรือวิธีสตรีมไลน์อัปวินด์เพโทรฟ-กาเลอร์กิน (streamline upwind Petrov-Galerkin method; SUPG) ซึ่งเป็นระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์วิธีหนึ่งเพื่อตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้น ในการวิเคราะห์จะใช้เซลล์ที่มีขนาดสม่ำเสมอและวางตัวอย่างเป็นระเบียบทั่วทั้งโดเมนของปัญหา ปัญหาที่ทำการวิเคราะห์ทั้งสิ้น 7 ปัญหา ได้แก่

1. ปัญหาการไหลเป็นขั้นในแนวเฉียง (the oblique step problem)
2. ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem)
3. ปัญหาการหมุนครบรอบของพัลส์แบบเกาส์เซียน (rotation of Gaussian pulse problem)
4. ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem)
5. ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem)
6. ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกระบาย (rotation of slotted cylinder problem)
7. ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิกซ์ (Smolarkiewicz's deformational flow problem)

จากนั้นจึงนำเสนอระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้ซึ่งเป็นการนำเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติมาผนวกเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ และนำมาวิเคราะห์ปัญหาที่มีผลจากการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสถานะไม่อยู่ตัวที่แตกต่างกันทั้งสิ้น 7 ปัญหา ได้แก่

1. ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem)

2. ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem)
3. ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ (boundary layer problem)
4. ปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียงเนื่องจากผลของการพา-การเกิดปฏิกิริยา (oblique inflow convection-reaction problem)
5. ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม (corner layer problem)
6. ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์ (advection of sine hill problem)
7. ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem)

### 5.1 การตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์

ในหัวข้อนี้การวิเคราะห์ปัญหาเพื่อตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVEM จะทำการวิเคราะห์ปัญหามันโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส โดยเริ่มจากการสร้างแบบจำลองทางการคำนวณซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดเท่า ๆ กันจำนวน 32,768 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ) ถูกวางตัวอย่างเป็นระเบียบบนโดเมนของการคำนวณ แบบจำลองดังกล่าวได้นำมาใช้วิเคราะห์ปัญหาเพื่อเปรียบเทียบผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลูมเอलिเมนต์และวิธีผลต่างอัปวินด์กับผลเฉลยแม่นยำตรงทั้งสิ้น 7 ปัญหา ได้แก่

#### 5.1.1 ปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง (the oblique step problem) [24]

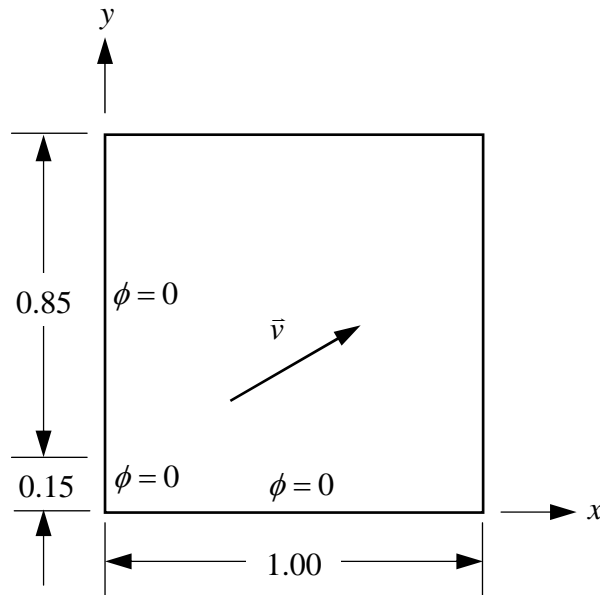
ปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง (the oblique step problem) เป็นปัญหาเบื้องต้นที่นิยมใช้สำหรับตรวจสอบความถูกต้องของระเบียบวิธีที่นำเสนอและโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน เนื่องจากปัญหานี้เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาอย่างเดียว (pure convection problem) ดังนั้นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่นำมาใช้วิเคราะห์ปัญหาจะลดรูปลง นั่นคือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.1)$$

เมื่อกำหนดให้เงื่อนไขขอบเขตทางเข้าของปัญหามีลักษณะเป็นชั้นบันไดจึงทำให้มีความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์เกิดขึ้น รูปแบบของปัญหาเป็นการไหลในโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (0,0) \times (1,1)$  ดังแสดงใน รูปที่ 5.1 โดยการไหลเกิดขึ้นในแนวเฉียงทำมุม 30 องศาจากสนามความเร็วซึ่งมีค่าคงที่เท่ากับ  $\vec{v} = \cos(\pi/6)\vec{i} + \sin(\pi/6)\vec{j}$  เงื่อนไขค่าเริ่มต้นของการคำนวณกำหนดให้  $\phi_0(x, y) = 0$  ตลอดทั่วทั้งโดเมน และเงื่อนไขขอบเขตที่ด้านซ้ายมือและด้านล่างของโดเมนกำหนดโดย

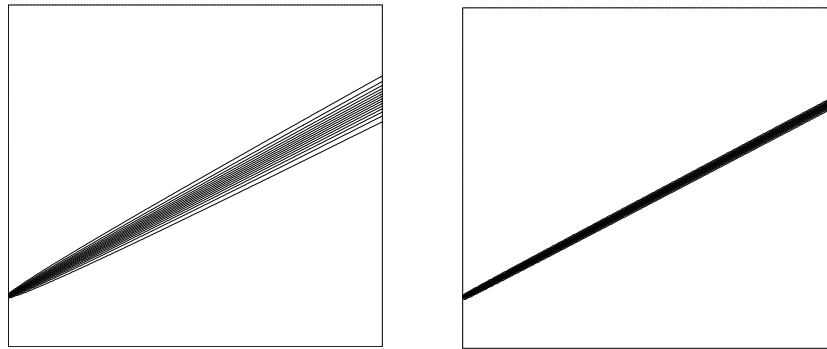


$$\phi(x, y, t) = \begin{cases} 1, & x=0, y \geq 0.15 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.2)$$



รูปที่ 5.1 ลักษณะของปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง

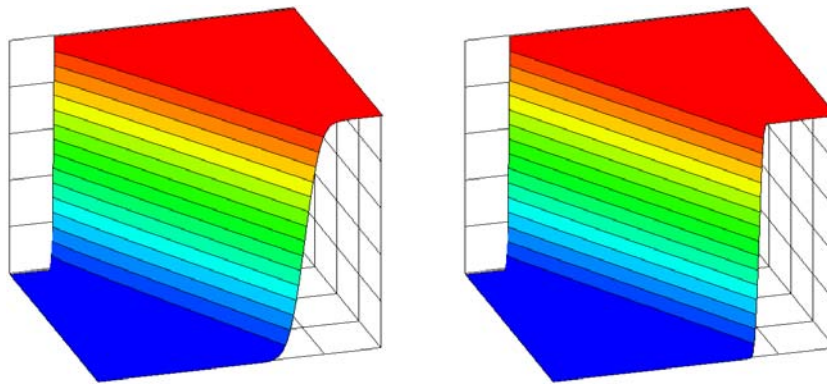
ปัญหาดังกล่าวถูกนำมาตรวจสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้น โดยเริ่มจากสร้างแบบจำลองทางการคำนวณซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดเท่า ๆ กันจำนวน 32,768 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ) ลักษณะการกระจายตัวของผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์เปรียบเทียบกับวิธีผลต่างอัปวินด์แสดงได้ในรูปของเส้นชั้น 2 มิติและแถบชั้นสี 3 มิติดังรูปที่ 5.2-5.3 ตามลำดับ และเมื่อนำผลการคำนวณที่ทางออกทางขอบขวาของโดเมนมาเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.4 พบว่าระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ให้ผลการคำนวณที่มีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงมากกว่าผลการคำนวณจากระเบียบวิธีผลต่างอัปวินด์



(ก) วิธี UDS

(ข) วิธี FVEM

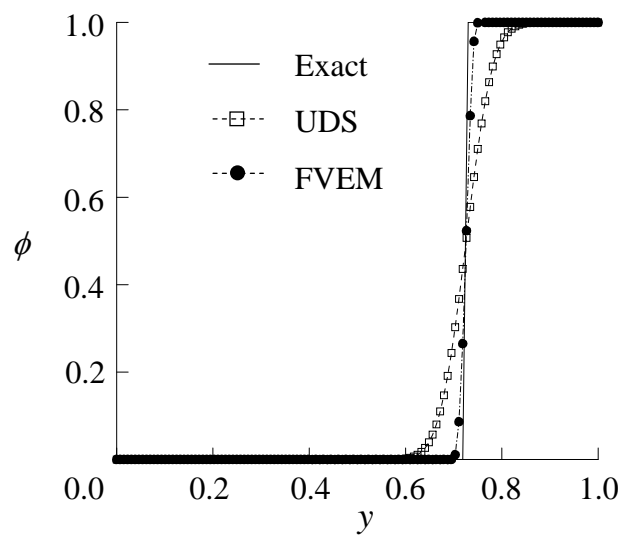
รูปที่ 5.2 เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง



(ก) วิธี UDS

(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.3 แล็บชั้นสีแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง



รูปที่ 5.4 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอัปวินด์และวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์สำหรับปัญหาการไหลเป็นชั้นในแนวเฉียง

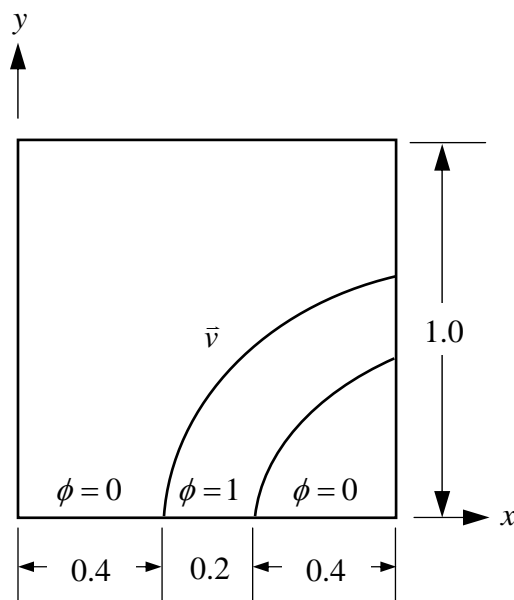
### 5.1.2 ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem) [25]

ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวกับการพาอย่างเดียว (pure convection problem) สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์ปัญหาคือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.3)$$

รูปแบบของปัญหากำหนดให้พัลส์รูปสี่เหลี่ยมขนาด  $\phi = 1$  ไหลเข้าบริเวณขอบด้านล่างของโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (0,0) \times (1,1)$  ดังแสดงในรูปที่ 5.5 การไหลเกิดขึ้นเนื่องจากสนามความเร็วซึ่งกำหนดให้มีค่าเท่ากับ  $\vec{v} = x\vec{i} + (1-y)\vec{j}$  โดยสนามความเร็วนี้จะพาพัลส์สี่เหลี่ยมให้เคลื่อนที่ในแนวเส้นโค้งออกไปทางขอบขวามือของโดเมน เงื่อนไขค่าเริ่มต้นของการคำนวณกำหนดให้  $\phi_0(x, y) = 0$  ตลอดทั่วทั้งโดเมน และเงื่อนไขขอบเขตที่ด้านล่างของโดเมนกำหนดโดย

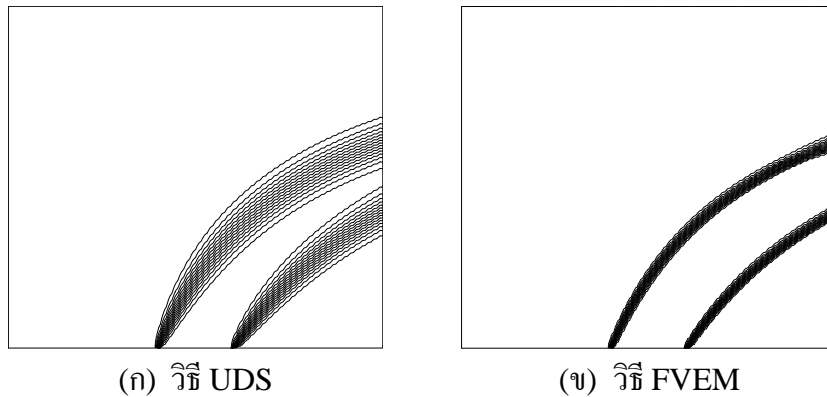
$$\phi(x, y, t) = \begin{cases} 1, & 0.4 \leq x \leq 0.6, y = 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.4)$$



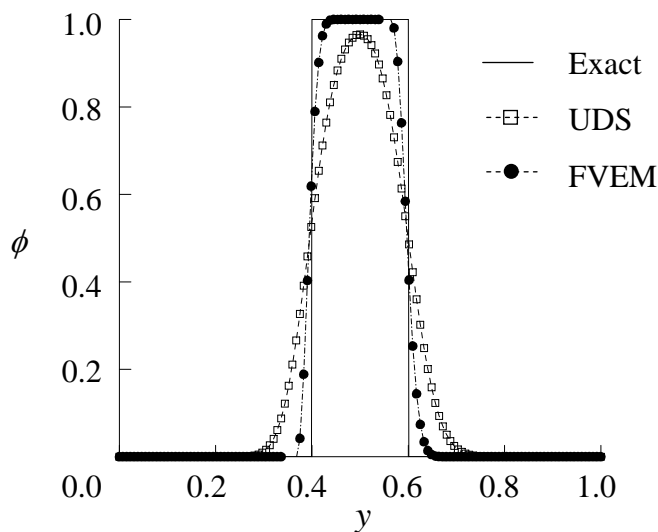
รูปที่ 5.5 ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม

ปัญหาดังกล่าวถูกนำมาวิเคราะห์โดยเริ่มจากใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดเท่า ๆ กันจำนวน 32,768 เซลล์ ลักษณะการกระจายตัวของผลลัพธ์จากการคำนวณแสดงได้ดังรูปที่ 5.6 และเมื่อนำผลการคำนวณที่ทางออกทางขอบขวาของโดเมนมา

เปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.7 พบว่าผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากระเบียบวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์มีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงมากกว่าผลการคำนวณจากระเบียบวิธีผลต่างอัปวินด์



รูปที่ 5.6 การกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม



รูปที่ 5.7 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอัปวินด์และวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม

### 5.1.3 ปัญหาการหมุนครบรอบของพัลส์แบบเกาส์เซียน (rotation of Gaussian pulse problem) [17]

ปัญหาการหมุนครบรอบของพัลส์แบบเกาส์เซียน (rotation of Gaussian pulse problem) เป็นอีกหนึ่งปัญหาที่นิยมใช้ทดสอบความถูกต้องของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ โดเมนของปัญหานี้เป็นโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (-0.5, -0.5) \times (0.5, 0.5)$  รูปแบบของปัญหา กำหนดให้เงื่อนไขค่าเริ่มต้นมีพัลส์แบบเกาส์เซียนซึ่งมีจุดศูนย์กลางอยู่ทางด้านซ้ายมือของโดเมนที่

ตำแหน่งโคออร์ดิเนต  $(-0.25, 0)$  เมื่อเวลาผ่านไปสนามความเร็วขนาด  $\vec{v} = -4y\vec{i} + 4x\vec{j}$  จะพาให้พัลส์นี้เคลื่อนที่ในทิศทางทวนเข็มนาฬิกาจนครบ 1 รอบกลับมาที่ตำแหน่งเดิม โดยใช้เวลาที่สั้นเท่ากับ  $\pi/2$  ปัญหาดังกล่าวสามารถคำนวณหาผลเฉลยแม่นยำตรงที่เวลาใด ๆ ได้ดังนี้

$$\phi(x, y, t) = \frac{2\sigma^2}{2\sigma^2 + 4t\varepsilon} \exp\left(-\frac{(x+0.25)^2 + y^2}{2\sigma^2 + 4t\varepsilon}\right) \quad (5.5)$$

โดยที่  $\sigma = 0.0447$  ดังนั้นเงื่อนไขค่าเริ่มต้นของปัญหาจึงมีค่าเท่ากับ

$$\phi_0(x, y) = \exp\left(-\frac{(x+0.25)^2 + y^2}{2\sigma^2}\right) \quad (5.6)$$

การวิเคราะห์ปัญหาสามารถแบ่งลักษณะของปัญหาออกเป็น 2 กรณี คือ

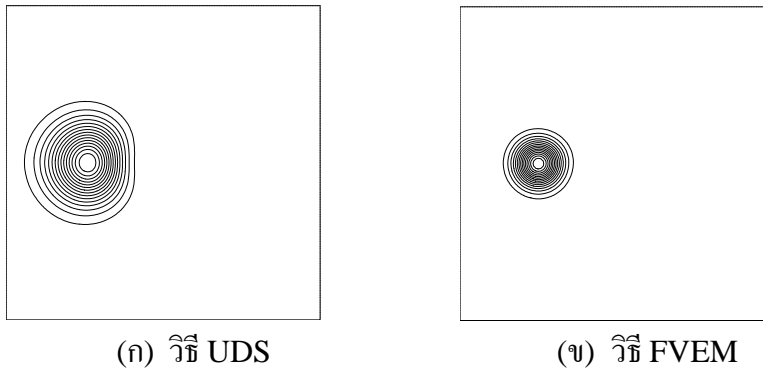
(1) ปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาอย่างเดียว (pure convection problem) ซึ่งกำหนดให้สัมประสิทธิ์ของการแพร่มีค่าเท่ากับศูนย์ ( $\varepsilon = 0$ ) สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.7)$$

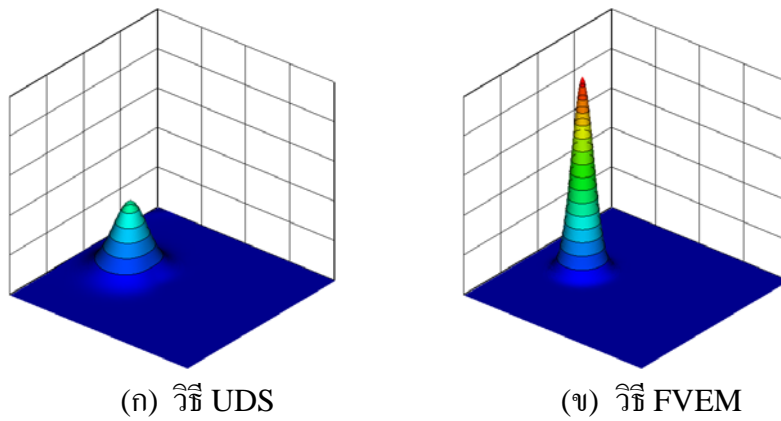
(2) ปัญหาที่การพามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการแพร่ (convection-dominated diffusion problem) ซึ่งกำหนดให้สัมประสิทธิ์ของการแพร่มีค่าเท่ากับ  $\varepsilon = 10^{-4}$  สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = 0 \quad (5.8)$$

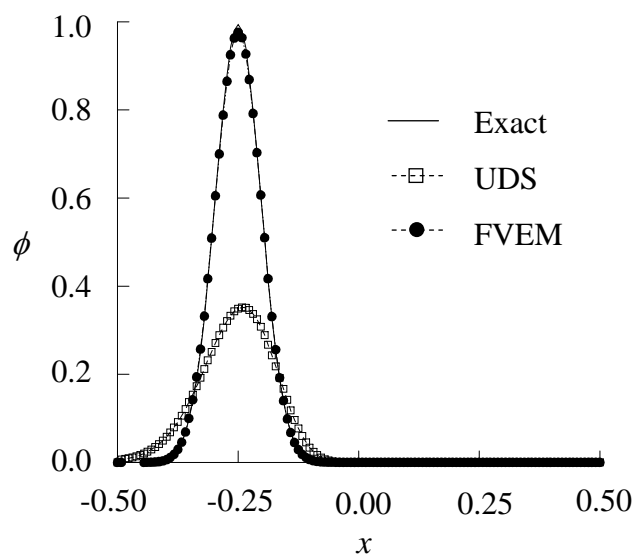
ผลเฉลยแม่นยำตรงเมื่อพัลส์หมุนครบ 1 รอบหากเป็นการไหลที่มีค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่เท่ากับ  $\varepsilon = 10^{-4}$  พบว่าความสูงของพัลส์มีค่าเท่ากับ  $\phi = 0.864$  ซึ่งมีค่าลดลงเนื่องมาจากการแพร่ ผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์และวิธีผลต่างอัปวินด์ของปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาอย่างเดียว ( $\varepsilon = 0$ ) แสดงได้ในรูปของเส้นชั้น 2 มิติและแถบชั้นสี่ 3 มิติดังรูปที่ 5.8-5.9 ตามลำดับ เมื่อนำค่าที่คำนวณได้บนเส้นกึ่งกลางโดเมน  $y = 0$  มาพล็อตเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.10 พบว่าค่าที่คำนวณได้จากวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์มีค่าสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงและมีความถูกต้องมากกว่าวิธีผลต่างอัปวินด์มาก



รูปที่ 5.8 เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 0$ )

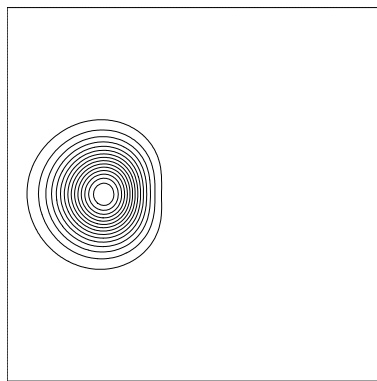


รูปที่ 5.9 แถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวสำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 0$ )

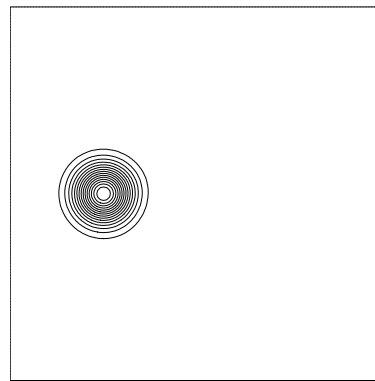


รูปที่ 5.10 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง  $y=0$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 0$ )

สำหรับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์และวิธีผลต่างอัปวินด์สำหรับปัญหาที่การพามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการแพร่ ซึ่งกำหนดให้สัมประสิทธิ์ของการแพร่มีค่าเท่ากับ  $\varepsilon = 10^{-4}$  สามารถแสดงผลการคำนวณในรูปแบบของเส้นชั้น 2 มิติและแถบชั้นสี 3 มิติดังรูปที่ 5.11-5.12 ตามลำดับ และเมื่อนำค่าที่คำนวณได้บนเส้นกึ่งกลางโดเมน  $y = 0$  มาพล็อตเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.13 พบว่าค่าที่คำนวณได้จากวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์มีค่าสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงและมีความถูกต้องมากกว่าวิธีผลต่างอัปวินด์เช่นเดียวกัน

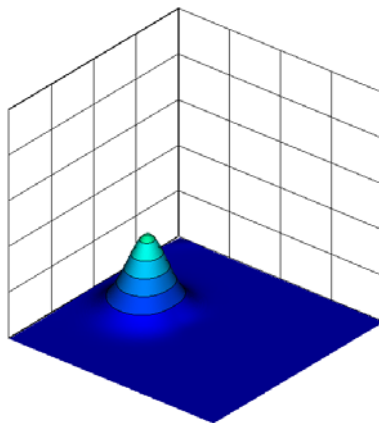


(ก) วิธี UDS

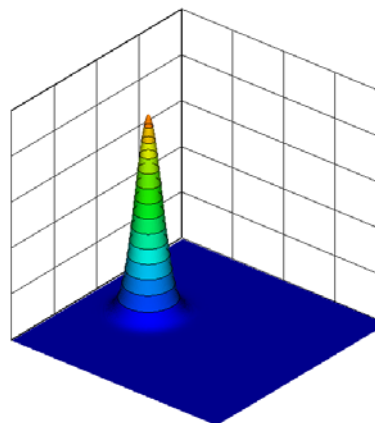


(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.11 เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ )

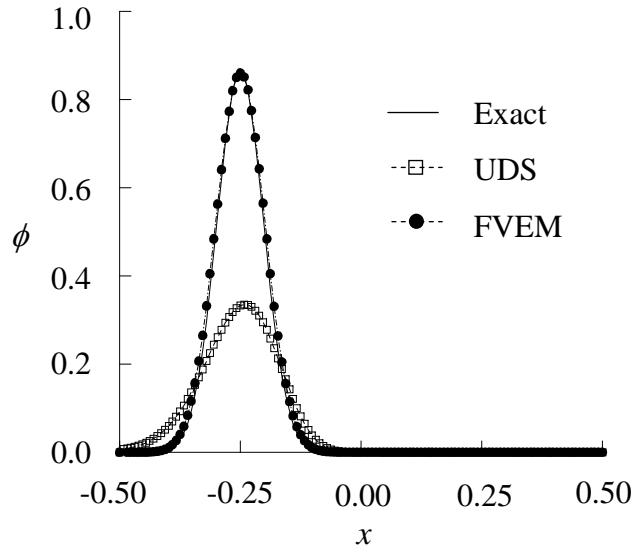


(ก) วิธี UDS



(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.12 แถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ )



รูปที่ 5.13 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง  $y=0$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์แบบเกาส์เซียน ( $\varepsilon = 10^{-4}$ )

#### 5.1.4 ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem) [17]

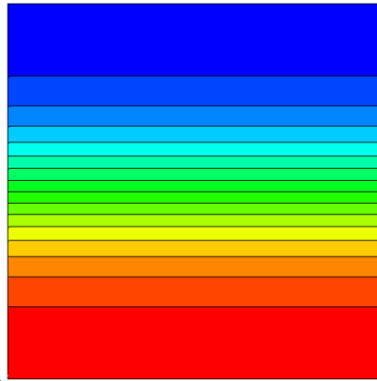
ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาอย่างเฉื่อย สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยสำหรับการวิเคราะห์คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.9)$$

โดเมนของปัญหาที่ใช้ในการวิเคราะห์เป็นโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด  $\Omega = (-4, -4) \times (4, 4)$  รูปแบบของปัญหาในตอนเริ่มต้นมีลักษณะเป็นเส้นชั้นของอุณหภูมิโดยมีอุณหภูมิสูงสุดที่ขอบด้านล่างของโดเมนและมีอุณหภูมิต่ำสุดที่ขอบบนของโดเมน ดังแสดงในรูปที่ 5.14 สมการแสดงเงื่อนไขค่าเริ่มต้นของปัญหาคือ

$$\phi_0(x, y) = -\tanh\left(\frac{y}{2}\right) \quad (5.10)$$





รูปที่ 5.14 เส้นชั้นแสดงค่าเงื่อนไขเริ่มต้นของปัญหาการไหลผสมกัน  
ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ

กำหนดให้สนามความเร็วมีค่าเท่ากับ

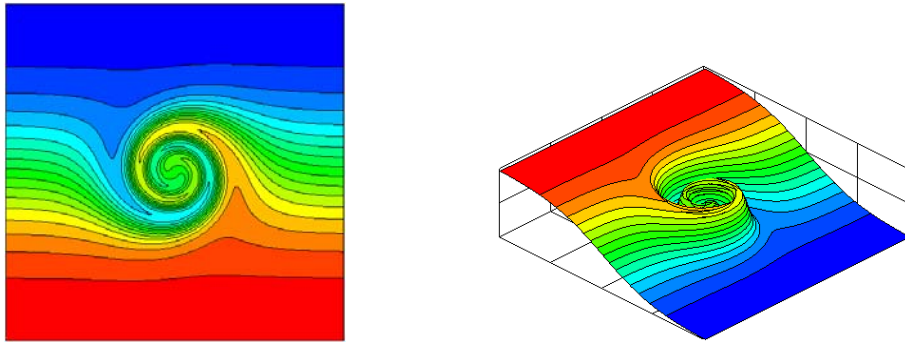
$$\vec{v} = -\frac{y}{r} \frac{f_t}{f_{\max}} \vec{i} + \frac{x}{r} \frac{f_t}{f_{\max}} \vec{j} \quad (5.11)$$

โดยที่  $r \equiv \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $f_{\max} = 0.385$  และ  $f_t = \frac{\tanh(r)}{\cosh^2(r)}$

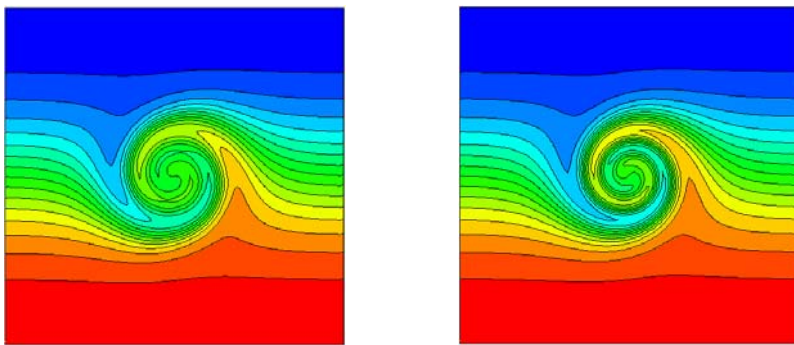
เมื่อเวลาผ่านไปสนามความเร็วนี้จะก่อให้เกิดการไหลผสมกันในลักษณะหมุนวน โดยมีจุดศูนย์กลางอยู่ที่ตำแหน่งกึ่งกลางของโดเมน  $(0, 0)$  ผลเฉลยแม่นยำสำหรับปัญหานี้ที่เวลา  $t = 4$  แสดงได้ดังรูปที่ 5.15 และมีค่าเท่ากับ

$$\phi(x, y, 4) = -\tanh\left(\frac{y}{2} \cos\left(\frac{4f_t}{0.385r}\right) - \frac{x}{2} \sin\left(\frac{4f_t}{0.385r}\right)\right) \quad (5.12)$$

ผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์และวิธีผลต่างอัปวินด์สามารถแสดงผลการคำนวณในรูปแบบของเส้นชั้น 2 มิติและแถบชั้นสี 3 มิติดังรูปที่ 5.16-5.17 ตามลำดับ เมื่อนำค่าที่คำนวณได้บนเส้นกึ่งกลางโดเมน  $y=0$  มาพล็อตเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำดังแสดงในรูปที่ 5.18 พบว่าค่าที่คำนวณได้จากวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์มีค่าสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำและมีความถูกต้องมากกว่าวิธีผลต่างอัปวินด์เช่นเดียวกัน



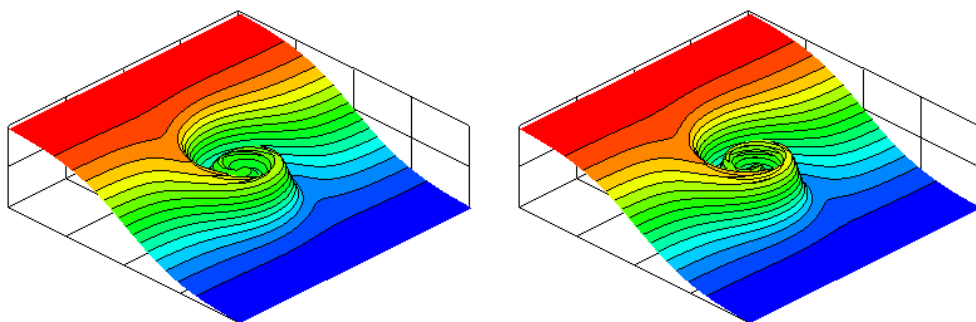
รูปที่ 5.15 ผลเฉลยแม่นยำตรงสำหรับปัญหาการไหลผสมกัน  
ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



(ก) วิธี UDS

(ข) วิธี FVEM

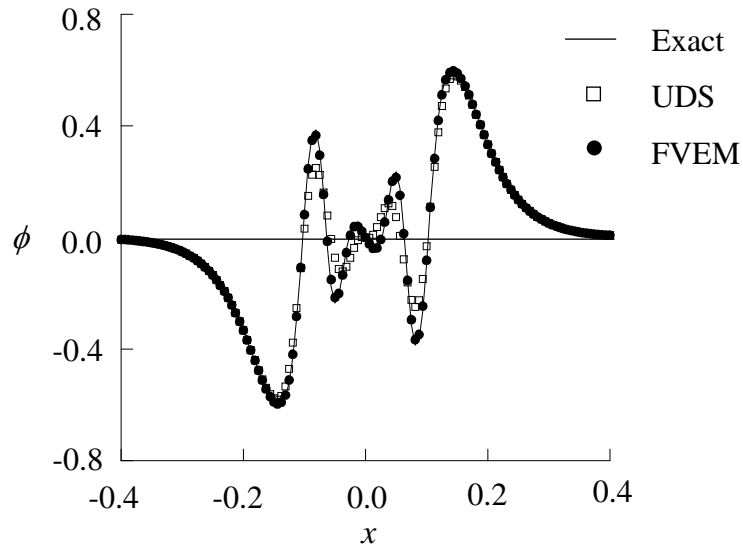
รูปที่ 5.16 เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลผสมกัน  
ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



(ก) วิธี UDS

(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.17 แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลผสมกัน  
ในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



รูปที่ 5.18 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณบนเส้นกึ่งกลาง  $y=0$  สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ

### 5.1.5 ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem) [5]

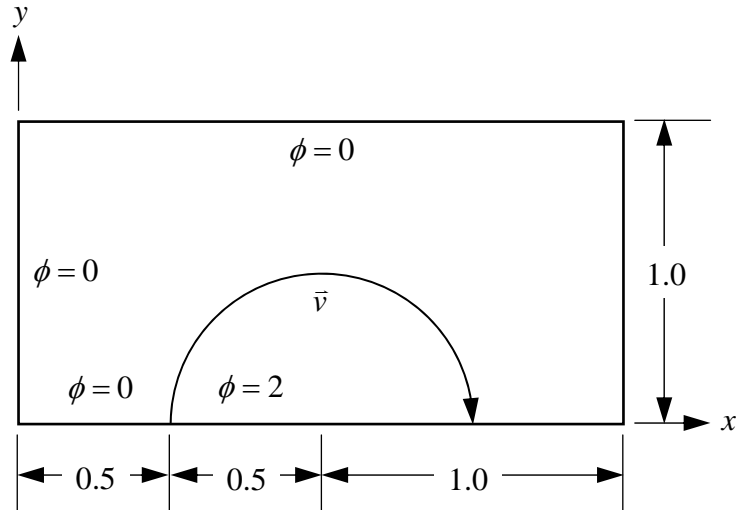
ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาอย่างเฉื่อย ดังนั้นสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยสำหรับการวิเคราะห์ปัญหาคือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.13)$$

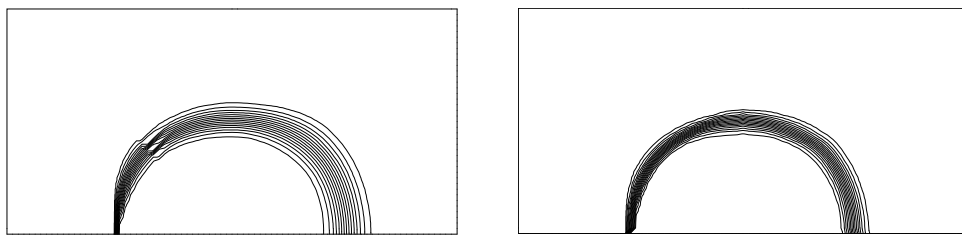
โดเมนในการคำนวณเป็นโดเมนสี่เหลี่ยมผืนผ้าขนาด  $\Omega = (-1, 0) \times (1, 1)$  การไหลเกิดขึ้นเนื่องจากสนามความเร็วซึ่งกำหนดให้มีค่าเท่ากับ  $\vec{v} = 2y(1-x^2)\vec{i} - 2x(1-y^2)\vec{j}$  เงื่อนไขขอบเขตมีลักษณะเป็นขั้นบันไดถูกกำหนดที่ขอบล่างซ้ายของโดเมนและสนามความเร็วนี้จะพาให้ตัวแปร  $\phi$  เคลื่อนที่ในแนวเส้นโค้งออกไปทางขอบล่างขวาของโดเมนในลักษณะตามเข็มนาฬิกา ดังแสดงในรูปที่ 5.19 เงื่อนไขค่าเริ่มต้นของการคำนวณกำหนดให้  $\phi_0(x, y) = 0$  ตลอดทั่วทั้งโดเมน

ปัญหาดังกล่าวถูกนำมาวิเคราะห์โดยใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดเท่า ๆ กันแบบไร้ระเบียบจำนวน 6,400 เซลล์ ( $\Delta x = 80, \Delta y = 40$ ) ลักษณะการกระจายตัวของผลลัพธ์จากการคำนวณเมื่อเปรียบเทียบกับระเบียบวิธีสตรีมไลน์อัปวินด์เพโทรพอลิโกลาร์คิน (SUPG) แสดงในรูปที่ 5.20 และเมื่อนำผลการคำนวณที่ทางออกของโดเมนมาพล็อตเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.21 พบว่าผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากระเบียบวิธี

ไฟในตัวของลุมเอลิเมนต์มีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงมากกว่าผลการคำนวณจากระเบียบวิธี  
สตรีมไลน์อัปวินด์เพรอฟ-กาเลอร์คิน



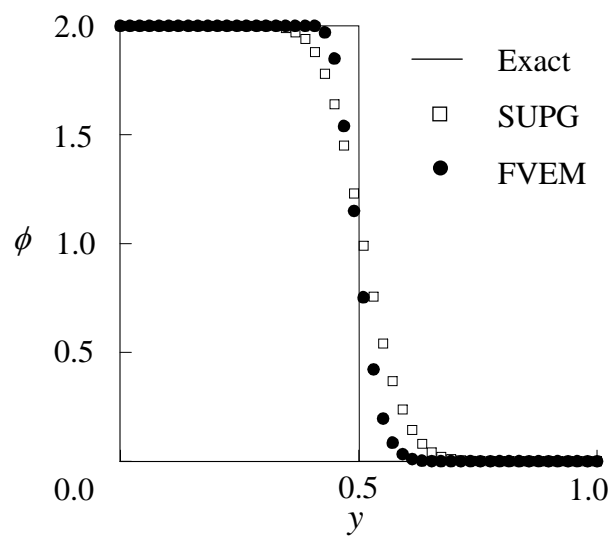
รูปที่ 5.19 ปัญหาของสมิทและฮัตตัน



(ก) วิธี UDS

(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.20 เส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปัญหาของสมิทและฮัตตัน



รูปที่ 5.21 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณ  
สำหรับปัญหาของสมิทและฮัตตัน

### 5.1.6 ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะรู (rotation of slotted cylinder problem) [26]

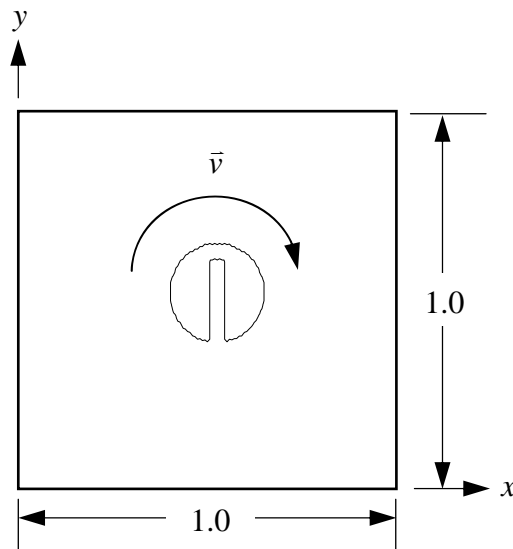
ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะรู (rotation of slotted cylinder problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพา สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.14)$$

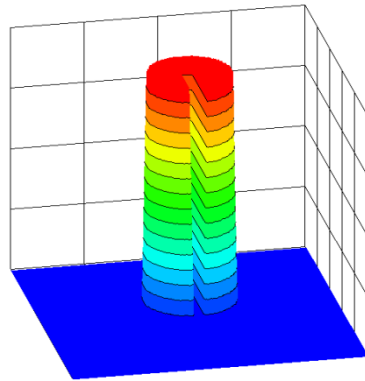
โดเมนของปัญหานี้เป็นโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (0,0) \times (1,1)$  รูปแบบของปัญหากำหนดให้เงื่อนไขค่าเริ่มต้นมีทรงกระบอกที่ถูกเจาะรูมีจุดศูนย์กลางอยู่ที่ตำแหน่งกึ่งกลางโดเมนดังแสดงในรูปที่ 5.22 เมื่อเวลาผ่านไปสนามความเร็วขนาด  $\vec{v} = (y-0.5)\vec{i} + (0.5-x)\vec{j}$  จะพาให้ทรงกระบอกนี้เคลื่อนที่ในทิศทางตามเข็มนาฬิกาจนครบรอบกลับมาที่ตำแหน่งเดิมโดยใช้เวลาเท่ากับ  $2\pi$  ปัญหาดังกล่าวมีเงื่อนไขเริ่มต้นคือ

$$\phi_0(x, y) = \begin{cases} 1, & (r \leq 0.15) \cap (|x-0.5| \geq 0.025 \cup (y-0.5) \geq 0.1) \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (5.15)$$

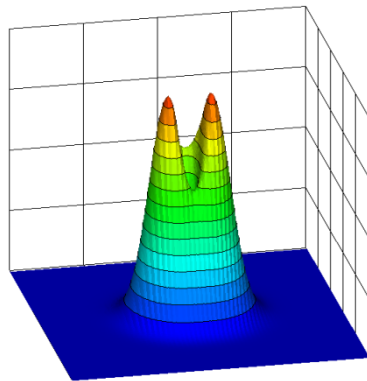
โดยที่  $r^2 = (x-0.5)^2 + (y-0.5)^2$  การคำนวณใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดเท่า ๆ กันจำนวน 32,768 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ) และแบบจำลองขนาด 131,072 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ ) ผลเฉลยแม่นยำและผลลัพธ์จากการคำนวณโดยใช้แบบจำลองทั้งสองขนาดแสดงผลเป็นแถบชั้นสี 3 มิติดังรูปที่ 5.23-5.25 ตามลำดับ ผลการคำนวณพบว่าระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ให้ผลลัพธ์ใกล้เคียงกับผลเฉลยแม่นยำแต่ต้องใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์ขนาดเล็กเป็นจำนวนมาก



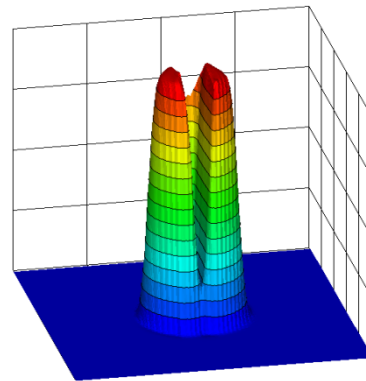
รูปที่ 5.22 ปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะรู



รูปที่ 5.23 ผลเฉลยแม่นยำตรงของปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง

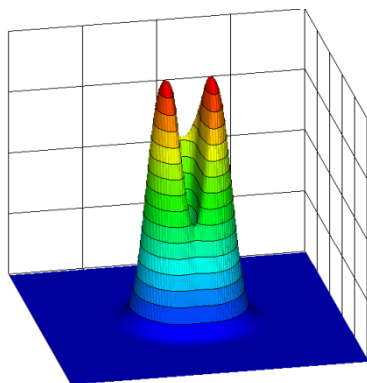


(ก) วิธี UDS

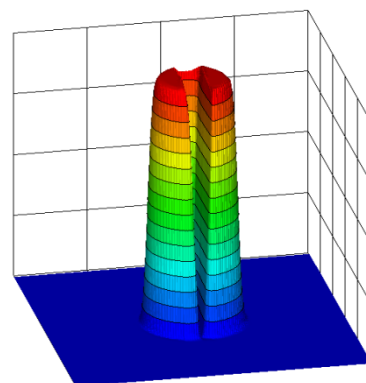


(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.24 แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ )



(ก) วิธี UDS



(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.25 แถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการหมุนครบรอบของทรงกระบอกที่ถูกเจาะร่อง ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ )

### 5.1.7 ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิตส์ (Smolarkiewicz's deformational flow problem) [27]

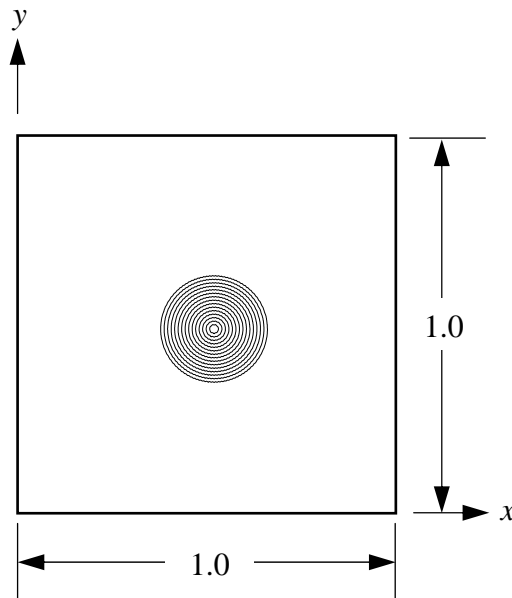
ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิตส์ (Smolarkiewicz's deformational flow problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพา สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.16)$$

โดเมนของปัญหานี้เป็นโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด  $\Omega = (0,0) \times (100,100)$  เงื่อนไขค่าเริ่มต้นของปัญหาเป็นรูปทรงกรวยความสูง 1 หน่วยและรัศมี 15 หน่วยมีจุดศูนย์กลางอยู่ที่ตำแหน่งกึ่งกลางโดเมนดังแสดงในรูปที่ 5.26 สนามความเร็วสำหรับปัญหานี้มีค่าเท่ากับ

$$\vec{v} = Ak \sin(kx) \sin(ky) \vec{i} + Ak \cos(kx) \cos(ky) \vec{j} \quad (5.17)$$

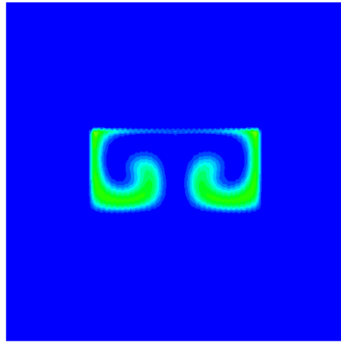
โดยที่  $k = \frac{4\pi}{L}$ ,  $A = 8$  และ  $L = 100$  แทนขนาดของโดเมนการคำนวณ



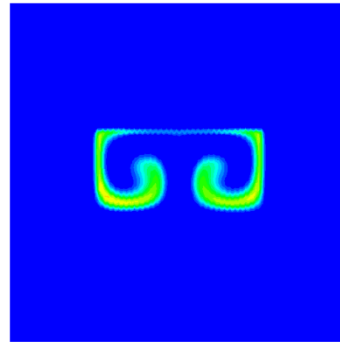
รูปที่ 5.26 ปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิตส์

การคำนวณใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดเท่า ๆ กันจำนวน 32,768 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ ) และแบบจำลองขนาด 131,072 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ ) โดยทำการคำนวณจนถึงเวลา  $t = 52.752$  ผลลัพธ์จากการคำนวณโดยใช้แบบจำลองทั้งสองขนาด

แสดงดังรูปที่ 5.27-5.28 ตามลำดับ เมื่อนำผลการคำนวณที่ได้ที่บริเวณครึ่งซ้ายของเส้นกึ่งกลางของโดเมนมาพล็อตเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงในรูปที่ 5.29 พบว่าระเบียบวิธีไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์ให้ผลลัพธ์ใกล้เคียงกับผลเฉลยแม่นยำตรงแต่ยังคงต้องใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์ขนาดเล็กเป็นจำนวนมาก

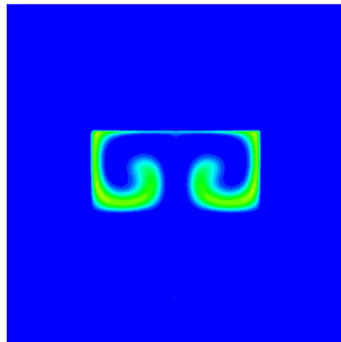


(ก) วิธี UDS

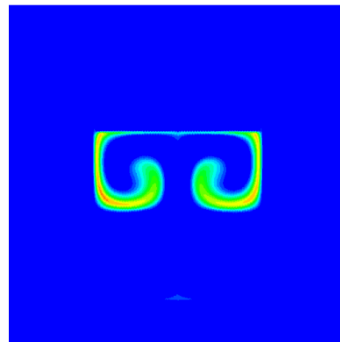


(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.27 เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิกส์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/128$ )



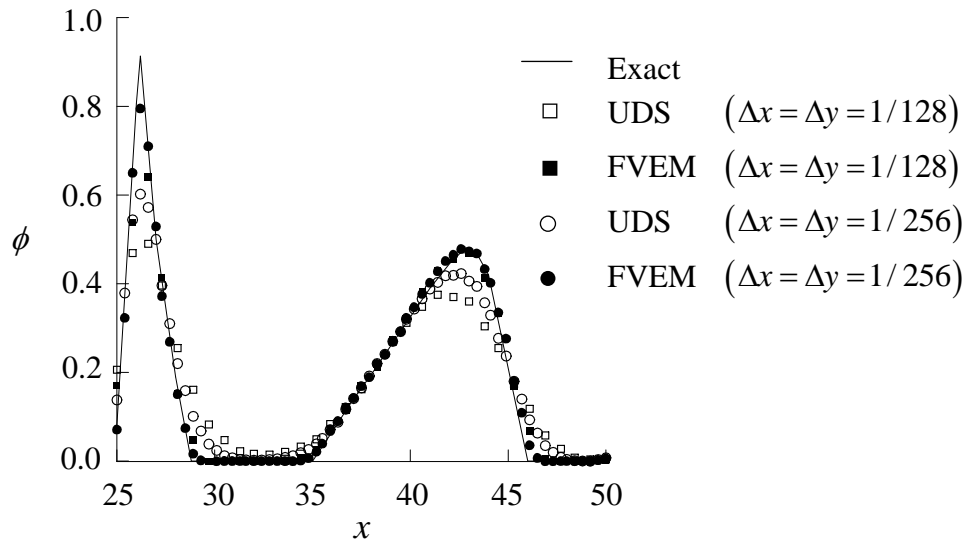
(ก) วิธี UDS



(ข) วิธี FVEM

รูปที่ 5.28 เส้นชั้นแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณของปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโมลาร์เควิกส์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/256$ )





รูปที่ 5.29 กราฟเปรียบเทียบผลเฉลยแม่นยำตรงกับผลลัพธ์จากการคำนวณ สำหรับปัญหาการไหลที่มีการเปลี่ยนรูปทรงของสโม่ลาร์ควิคส์

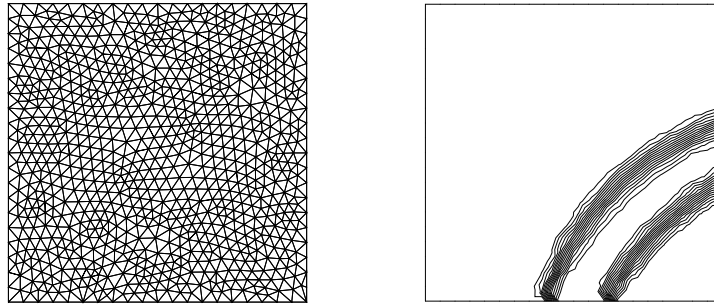
## 5.2 การวิเคราะห์ปัญหาโดยใช้เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ

หลังจากที่ได้ทำการตรวจสอบความถูกต้องของไฟในตัวอย่างลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรม คอมพิวเตอร์จนเกิดความมั่นใจแล้ว ในหัวข้อนี้จะนำเอาเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ มาผนวกเข้ากับ โปรแกรมคอมพิวเตอร์ดังกล่าวเพื่อให้ได้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องมากยิ่งขึ้น ปัญหาที่นำมาทำการวิเคราะห์ประกอบด้วยปัญหาที่มีผลจากการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสถานะไม่ อยู่ตัวที่แตกต่างกันทั้งสิ้น 7 ปัญหา ได้แก่

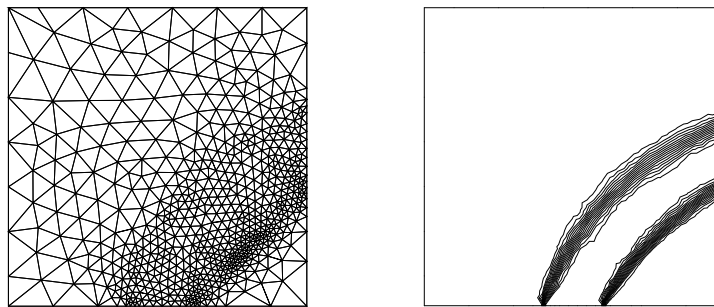
### 5.2.1 ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมในโดเมนสี่เหลี่ยม (the square pulse flow in a square domain problem)

ปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยมนี้ได้ทำการวิเคราะห์เพื่อตรวจสอบความถูกต้อง ของโปรแกรมคอมพิวเตอร์แล้วในหัวข้อ 5.1.2 ในการแสดงประสิทธิภาพของเทคนิคการปรับ ขนาดเมชโดยอัตโนมัติเริ่มจากแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดสม่ำเสมอจำนวน 1,642 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/20$ ) วางตัวอย่างไว้ระเบียบภายในโดเมน เมื่อนำค่าของปริมาณ สเกลาร์ที่คำนวณได้จากแบบจำลองนี้มาใช้คำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมเพื่อทำการปรับ ขนาดเมชครั้งที่ 1 จะได้รูปแบบจำลองขนาด 1,254 เซลล์ จากนั้นจึงทำการปรับขนาดเมชครั้งที่ 2 และ 3 จะได้รูปแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมจำนวน 1,526 เซลล์และ 5,072 เซลล์ ตามลำดับ โดยรูปที่ 5.30-5.33 แสดงถึงรูปแบบจำลองต่าง ๆ และเส้นชั้นแสดงผลจากการ คำนวณที่สอดคล้องกัน เมื่อนำผลการคำนวณที่ทางออกทางขอบขวาของโดเมนมาเปรียบเทียบกับ

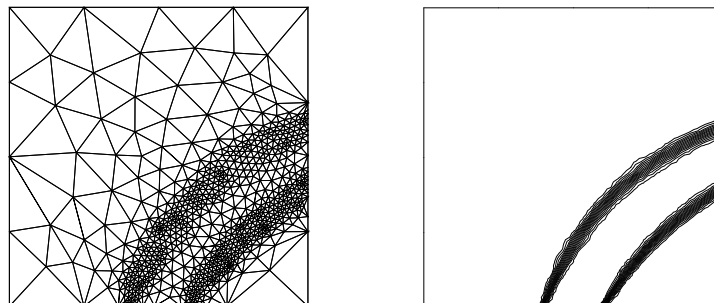
ผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงในรูปที่ 5.34 พบว่าผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากการปรับขนาดเมชครั้งที่ 3 มีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงมากกว่ากรณีที่ใช้เซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอ รวมถึงใช้เวลาในการคำนวณและใช้หน่วยความจำน้อยกว่ากรณีใช้เมชขนาดเล็กรวมทั้งโดเมนในหัวข้อ 5.1.2 ในขณะที่ให้ผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องแม่นยำมากกว่า



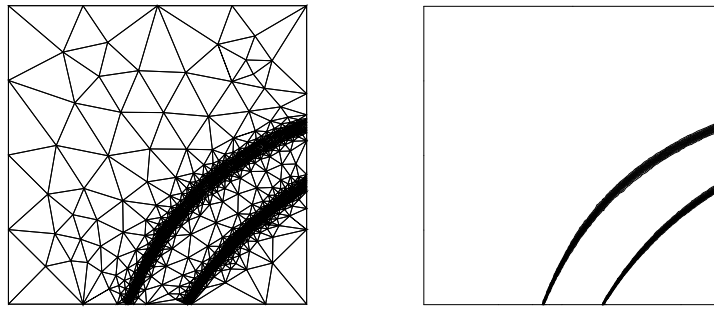
รูปที่ 5.30 แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม



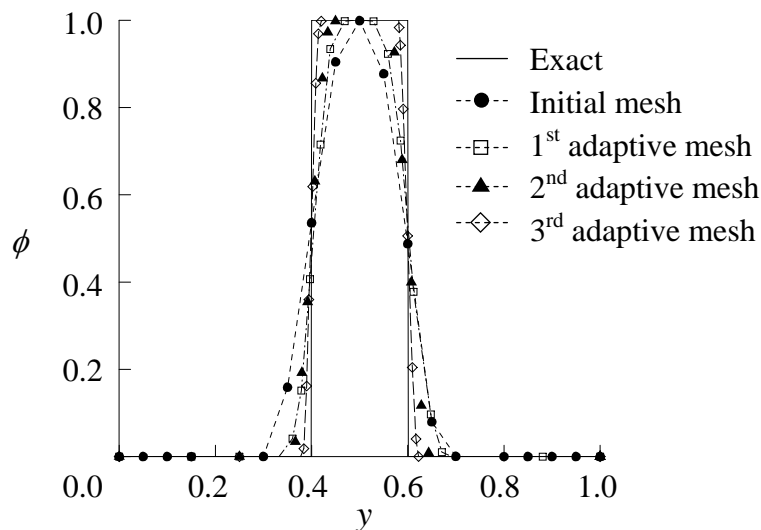
รูปที่ 5.31 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม



รูปที่ 5.32 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม



รูปที่ 5.33 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม

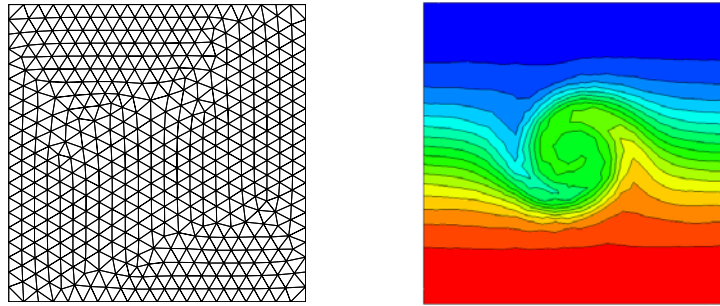


รูปที่ 5.34 กราฟเปรียบเทียบการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  ที่ขอบขวาของโดเมน  $x=1$  สำหรับปัญหาการไหลของพัลส์สี่เหลี่ยม

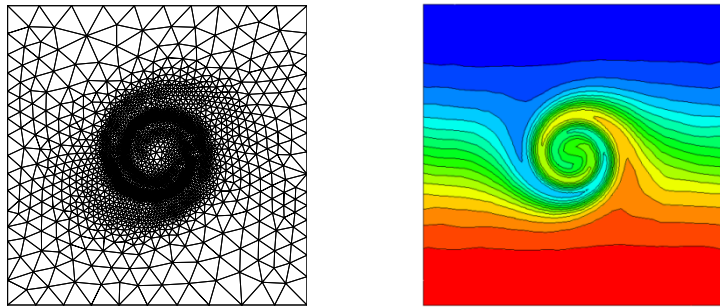
### 5.2.2. ปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ (mixing of hot with cold front problem)

รูปแบบปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ ได้อธิบายอยู่ในหัวข้อ 5.1.4 ในการแสดงประสิทธิภาพของเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ เริ่มจากแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดสม่ำเสมอที่มีขนาด 0.4 จำนวน 884 เซลล์ วางตัวอย่างไว้ระเหยภายในโดเมน เมื่อนำค่าของปริมาณสเกลาร์ที่คำนวณได้จากแบบจำลองนี้มาใช้คำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมเพื่อทำการปรับขนาดเมชครั้งที่ 1 จะได้รูปแบบจำลองขนาด 5,086 เซลล์ จากนั้นจึงทำการปรับขนาดเมชครั้งที่ 2 และ 3 จะได้รูปแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมจำนวน 4,584 เซลล์และ 7,480 เซลล์ตามลำดับ โดยในการปรับขนาดเมชครั้งที่ 3 ขนาดของเซลล์ที่เล็กที่สุดมีค่าเท่ากับ 0.004 รูปที่ 5.35-5.38 แสดงรูปแบบ

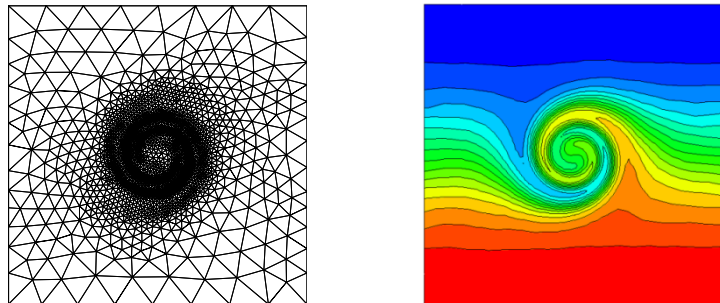
จำลองต่าง ๆ และเส้นชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์คอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน ผลลัพธ์ที่คำนวณได้จากการปรับขนาดเมชครั้งที่ 3 มีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำและมีความชัดเจนในบริเวณที่การไหลเกิดการผสมกันมากกว่ากรณีที่ใช้เซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอ



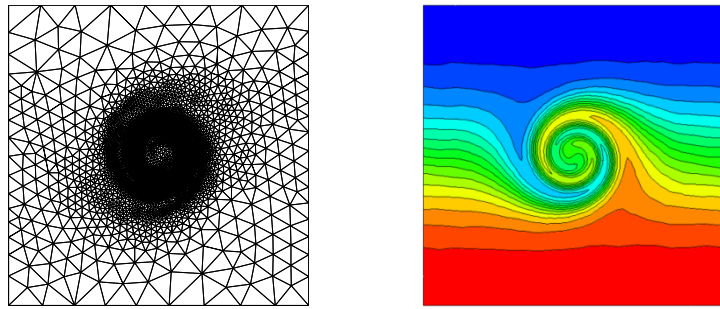
รูปที่ 5.35 แบบจำลองไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์เริ่มแรกและการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



รูปที่ 5.36 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



รูปที่ 5.37 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ



รูปที่ 5.38 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำ

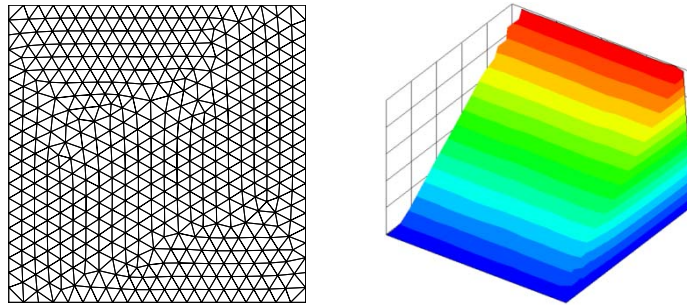
### 5.2.3. ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ (boundary layer problem) [28]

ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ (boundary layer problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาและการแพร่สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

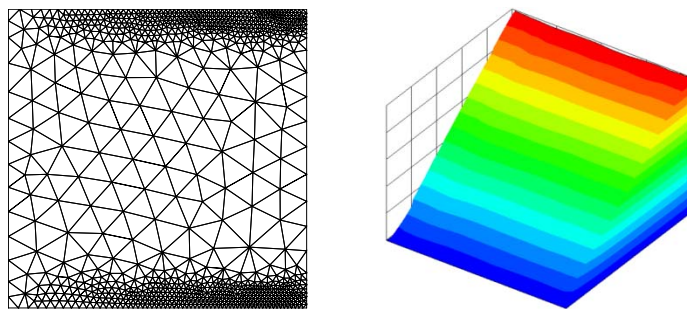
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) = q \quad (5.18)$$

การไหลเกิดขึ้นภายในโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัสขนาด  $1 \times 1$  หน่วย กำหนดให้เงื่อนไขค่าเริ่มต้นของปัญหามีค่าเท่ากับศูนย์ตลอดทั่วทั้งโดเมน  $\phi_0(x, y) = 0$  สนามความเร็วมีค่าเท่ากับ  $\vec{v} = 1\vec{i}$  โดยมีสัมประสิทธิ์ของการแพร่และค่าของแหล่งกำเนิดเท่ากับ  $\varepsilon = 10^{-4}$  และ  $q = 1$  ตามลำดับ เงื่อนไขขอบเขตกำหนดให้มีค่าเท่ากับศูนย์ตลอดขอบซ้ายมือ ขอบบนและล่างของโดเมน

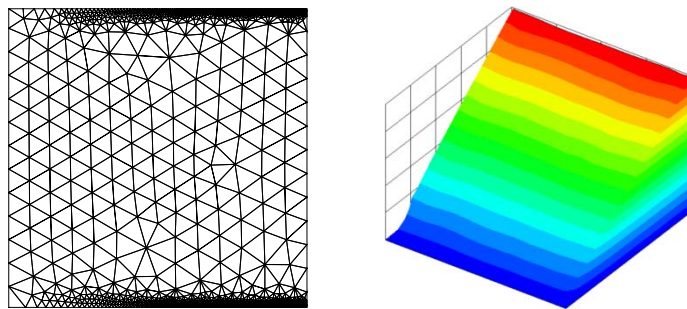
แบบจำลองไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์ที่ใช้ในตอนเริ่มต้นมีลักษณะเดียวกันกับปัญหาการไหลผสมกันในบริเวณที่มีอุณหภูมิสูงกับบริเวณที่มีอุณหภูมิต่ำกล่าวคือใช้เซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาด 0.4 จำนวน 884 เซลล์วางตัวอย่างไว้ระเบียบภายในโดเมน หลังจากทำการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติทั้งสิ้น 3 ครั้งจะได้แบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์จำนวน 1,842 2,691 และ 3,969 เซลล์ตามลำดับ โดยในการปรับขนาดเมชครั้งที่ 3 ขนาดของเซลล์ที่ใหญ่ที่สุดและเล็กที่สุดคือ 0.1 และ 0.002 ตามลำดับ รูปที่ 5.39-5.42 แสดงรูปแบบจำลองทางการคำนวณต่าง ๆ และเส้นชั้นสีแสดงผลพักจากการคำนวณด้วยไฟไนต์วอลูมเอลิเมนต์คอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน ผลลัพธ์จากการคำนวณเมื่อใช้แบบจำลองเริ่มต้นแสดงให้เห็นว่ามีการสั่นเกิดขึ้นบริเวณขอบบนและล่างที่ตำแหน่งใกล้เคียงกับทางออกขวามือของโดเมน และการสั่นนี้จะหายไปเมื่อทำการปรับขนาดเมชให้มีเซลล์ขนาดเล็กในบริเวณดังกล่าว



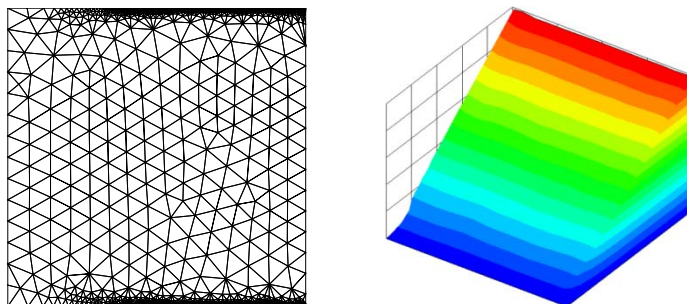
รูปที่ 5.39 แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ



รูปที่ 5.40 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ



รูปที่ 5.41 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ



รูปที่ 5.42 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่ขอบ

### 5.2.4 ปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียงเนื่องจากผลของการพา-การเกิดปฏิกิริยา (oblique inflow convection-reaction problem) [29]

ปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียงเนื่องจากผลของการพา-การเกิดปฏิกิริยา (oblique inflow convection-reaction problem) เป็นปัญหาการไหลภายในโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (0,0) \times (1,1)$  สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

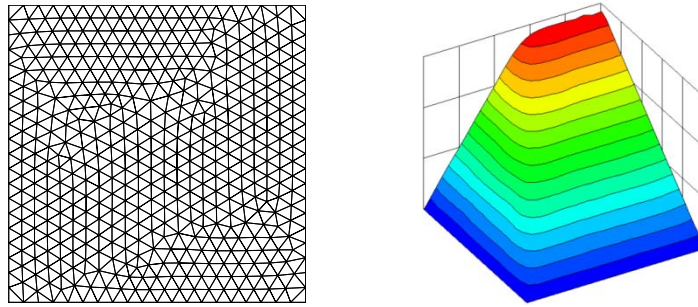
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} + \kappa\phi = q \quad (5.19)$$

กำหนดให้พจน์เนื่องจากแหล่งกำเนิดมีค่าเท่ากับ 1 เงื่อนไขเริ่มต้นของปัญหาเท่ากับศูนย์ทั่วทั้งโดเมน และสนามความเร็วมีค่าเท่ากับ  $\vec{v} = V \cos(\pi/3)\vec{i} + V \sin(\pi/3)\vec{j}$  ซึ่งจะพาให้ปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ไหลออกไปในแนวเฉียงทำมุม 60 องศากับแกน  $x$  และไหลออกทางขอบด้านบนของโดเมนในขณะที่การเกิดปฏิกิริยาจะทำให้ปริมาณสเกลาร์  $\phi$  มีค่าเพิ่มมากขึ้น การวิเคราะห์ปัญหาดังกล่าวสามารถแบ่งลักษณะของปัญหาออกเป็น 2 กรณี คือ

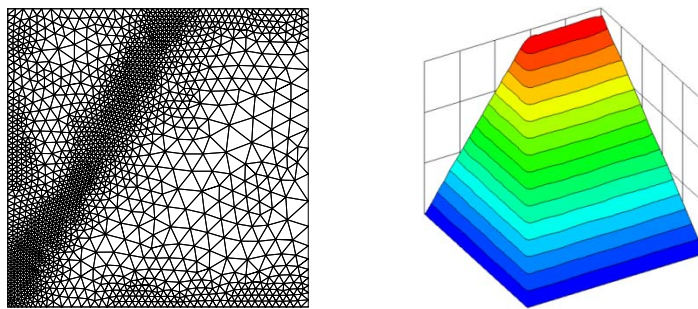
- (1) ปัญหาที่การพามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการเกิดปฏิกิริยา (convection-dominated reaction problem) ซึ่งกำหนดค่าโดย  $V = 1.0, \kappa = 10^{-4}$
- (2) ปัญหาที่การเกิดปฏิกิริยามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการพา (reaction-dominated convection problem) ซึ่งกำหนดค่าโดย  $V = 10^{-4}, \kappa = 1.0$

การวิเคราะห์ปัญหาทั้งสองกรณีเริ่มจากการใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอจำนวน 884 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/20$ ) รูปที่ 5.43-5.46 แสดงแบบจำลองและแถบชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณสำหรับปัญหาที่การพามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการเกิดปฏิกิริยาที่เวลา  $t = 2$  หลังจากทำการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติทั้งสิ้น 3 ครั้งจะได้แบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์จำนวน 3,580 6,758 และ 5,473 เซลล์ตามลำดับ และรูปที่ 5.47-5.50 แสดงแบบจำลองและผลการคำนวณสำหรับปัญหาที่การเกิดปฏิกิริยามีอิทธิพลต่อการไหลมากกว่าการพาที่เวลา  $t = 1$  หลังจากทำการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติทั้งสิ้น 3 ครั้งจะได้แบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์จำนวน 4,848 6,469 และ 6,732 เซลล์ตามลำดับ ผลลัพธ์จากการคำนวณทั้งสองกรณีบนแบบจำลองเริ่มต้นพบว่าการสั่นเกิดขึ้นบริเวณด้านหน้าที่มีการไหลเกิดขึ้นและการสั่นนี้จะหายไปเมื่อทำการปรับขนาดเมชให้มีเซลล์ขนาดเล็กในบริเวณดังกล่าว

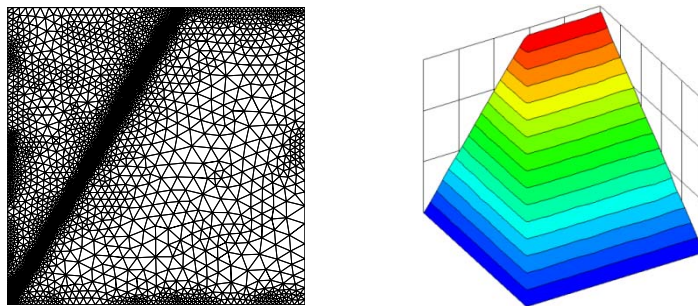




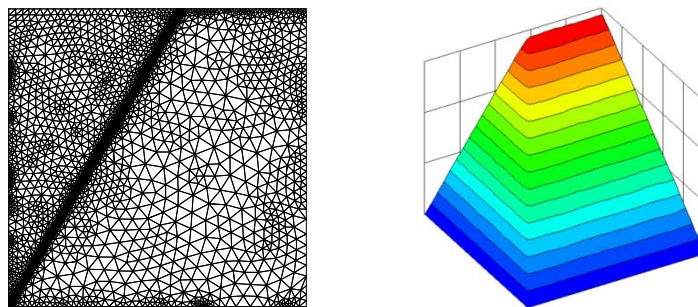
รูปที่ 5.43 แบบจำลองไฟไนต์เอลิเมนต์เริ่มแรกและแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 1.0, \kappa = 10^{-4}$ )



รูปที่ 5.44 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 1.0, \kappa = 10^{-4}$ )

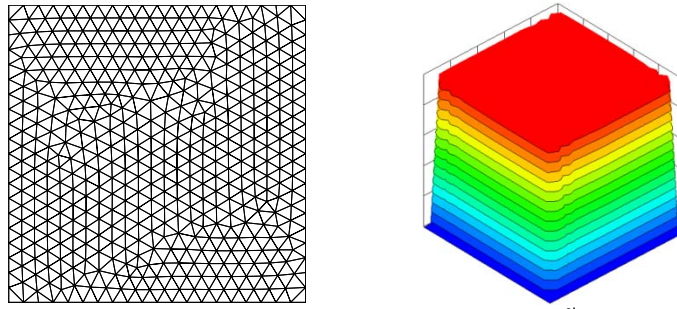


รูปที่ 5.45 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 1.0, \kappa = 10^{-4}$ )

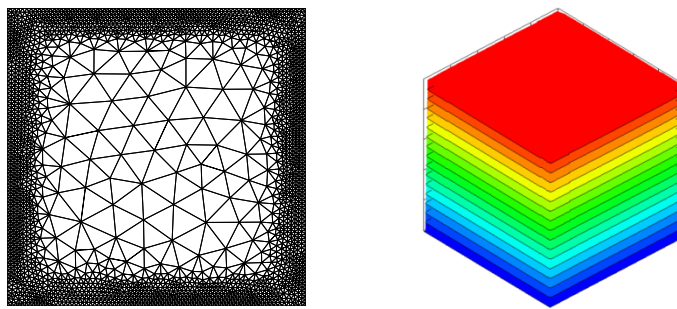


รูปที่ 5.46 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 1.0, \kappa = 10^{-4}$ )

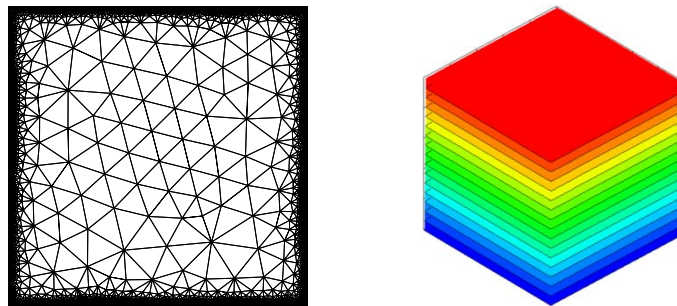




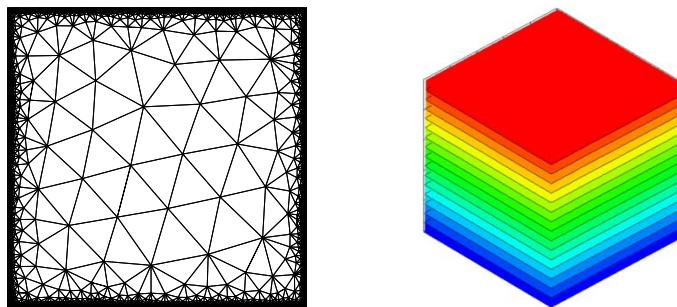
รูปที่ 5.47 แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มอิเล็กเมนต์เริ่มแรกและแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 1.0$ )



รูปที่ 5.48 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 1.0$ )



รูปที่ 5.49 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 1.0$ )



รูปที่ 5.50 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเข้าแบบลาดเอียง ( $V = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 1.0$ )

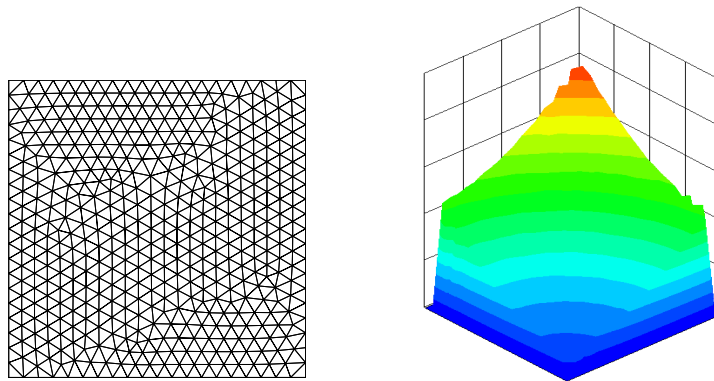
### 5.2.5 ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม (corner layer problem) [30]

ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม (corner layer problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการแพร่และการเกิดปฏิกิริยาบนโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (0,0) \times (1,1)$  สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์คือ

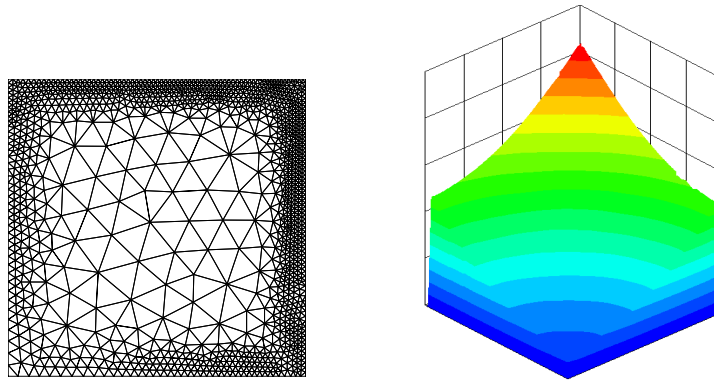
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \kappa \phi = q \quad (5.20)$$

รูปแบบของปัญหากำหนดให้สัมประสิทธิ์ของการพามีค่าเท่ากับ  $\varepsilon = 10^{-3}$  และสัมประสิทธิ์ของการเกิดปฏิกิริยามีค่าเท่ากับ  $\kappa = 2$  พจน์เนื่องจากแหล่งกำเนิดมีค่าเท่ากับ  $q = 20(x^2 + y^2) + 4$  กำหนดให้เงื่อนไขเริ่มต้นและเงื่อนไขขอบเขตเท่ากับศูนย์ทั่วทั้งโดเมนและทำการวิเคราะห์จนถึงเวลา  $t = 5$  ลักษณะของปัญหาดังกล่าวจะก่อให้เกิดผลลัพธ์ที่มีความชันสูงในบริเวณขอบบนและขอบขวาของโดเมน  $x = 1$  และ  $y = 1$  โดยมีค่าสูงสุดที่ตำแหน่งโคออร์ดิเนต  $(1,1)$

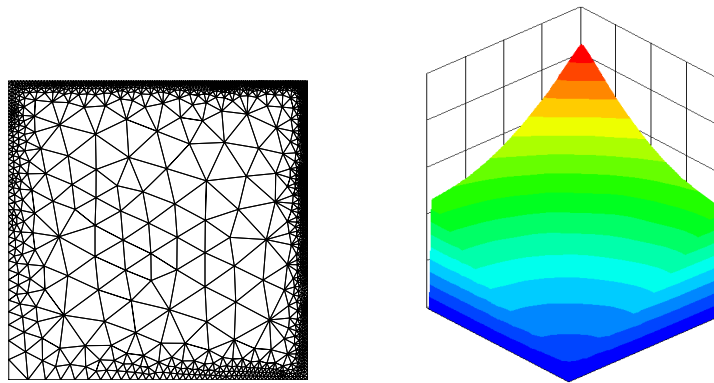
การวิเคราะห์ปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุมเริ่มจากการใช้แบบจำลองซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอจำนวน 884 เซลล์ ( $\Delta x = \Delta y = 1/20$ ) เมื่อนำปริมาณสเกลาร์  $\phi$  ที่คำนวณได้จากแบบจำลองนี้มาใช้คำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมเพื่อทำการปรับขนาดเมฆจะก่อให้เกิดเซลล์ที่มีขนาดเล็กบริเวณขอบบนและขอบขวามือของโดเมนและเซลล์ที่มีขนาดใหญ่ในบริเวณอื่น ๆ ผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยแบบจำลองเริ่มแรกมีการสั่นเกิดขึ้นที่ขอบดังกล่าวและเมื่อทำการปรับขนาดเมฆแล้วการสั่นของผลลัพธ์จึงลดลงตามลำดับรูปที่ 5.51-5.54 แสดงแบบจำลองและแถบชั้นสีแสดงผลจากการคำนวณ หลังจากทำการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติทั้งสิ้น 3 ครั้งจะได้แบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์จำนวน 2,616 2,867 และ 4,581 เซลล์ตามลำดับ



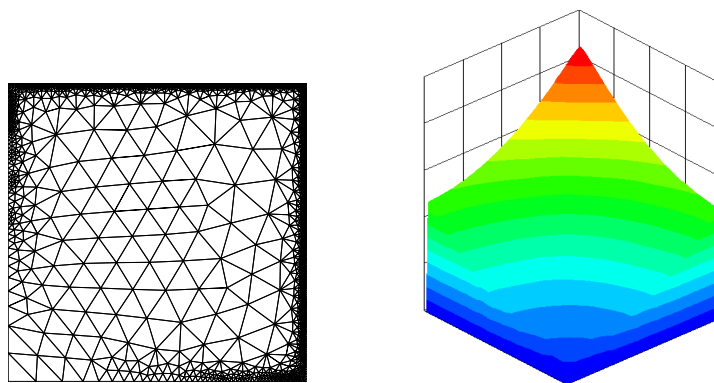
รูปที่ 5.51 แบบจำลองไฟในตัวของลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุม



รูปที่ 5.52 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุ่ม



รูปที่ 5.53 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุ่ม



รูปที่ 5.54 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และแถบชั้นสีแสดงการกระจายตัวของ ปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการไหลเป็นแนวชั้นที่มุ่ม

### 5.2.6 ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์ (advection of sine hill problem) [13]

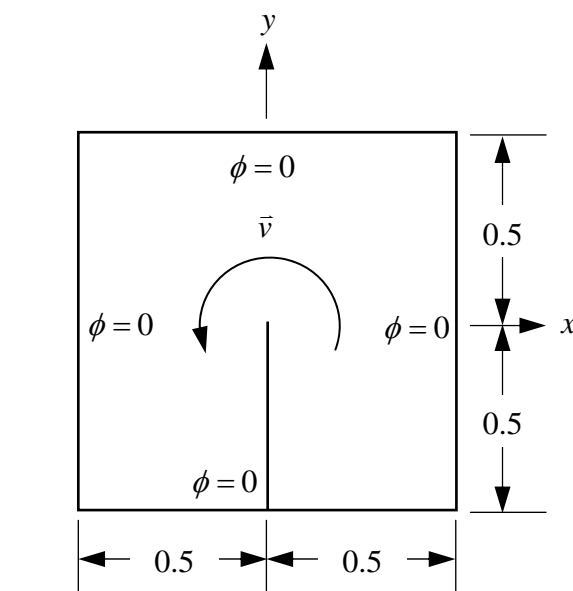
ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์ (advection of sine hill problem) เป็นปัญหาที่เกี่ยวข้องกับการพาบนโดเมนสี่เหลี่ยมจัตุรัส  $\Omega = (-0.8, -0.8) \times (0.8, 0.8)$  สมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่ใช้สำหรับวิเคราะห์ปัญหาคือ

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u\phi)}{\partial x} + \frac{\partial (v\phi)}{\partial y} = 0 \quad (5.21)$$

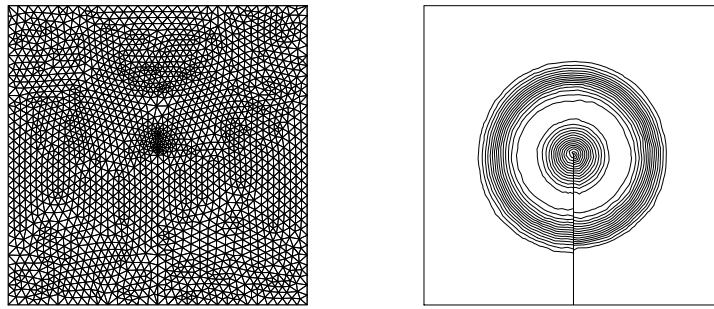
รูปแบบของปัญหาแสดงได้ดังรูปที่ 5.55 โดยกำหนดให้สนามความเร็วมีค่าเท่ากับ  $\vec{v} = -y\vec{i} + x\vec{j}$  สนามความเร็วนี้จะพาให้ปริมาณสเกลาร์  $\phi$  หมุนวนในทิศทางทวนเข็มนาฬิกา เงื่อนไขขอบเขตภายนอกของโดเมนเท่ากับศูนย์และขอบเขตภายในกำหนดให้มีการไหลเข้าซึ่งมีค่าเท่ากับ

$$\phi(x, y, t) = -\sin(2\pi y), \quad (-0.5 \leq y \leq 0) \cap (x=0) \quad (5.22)$$

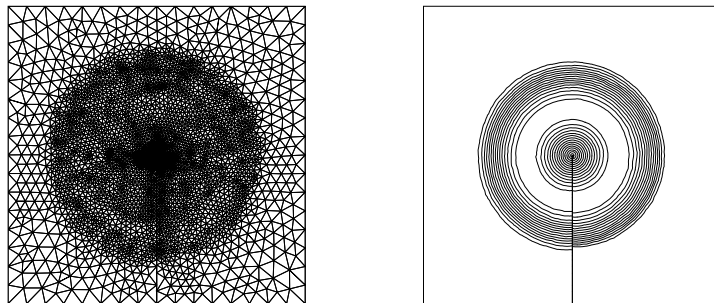
การวิเคราะห์ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์เริ่มจากการใช้แบบจำลองไว้ระเบียนซึ่งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดสม่ำเสมอจำนวน 3,982 เซลล์ เมื่อทำการปรับขนาดเมชเพียงสองครั้งจะได้ผลลัพธ์มีค่าสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำตรงดังแสดงรูปที่ 5.56-5.58 แบบจำลองจากการปรับขนาดทั้งสองครั้งประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมจำนวน 8,522 และ 31,538 เซลล์ตามลำดับ



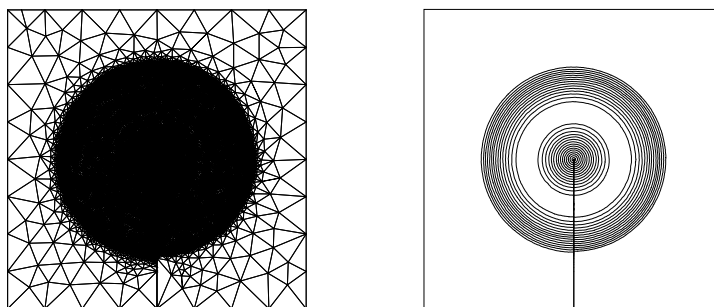
รูปที่ 5.55 ปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์



รูปที่ 5.56 แบบจำลองไฟในควอดรูเมอติเมนต์เริ่มแรกและเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์



รูปที่ 5.57 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์

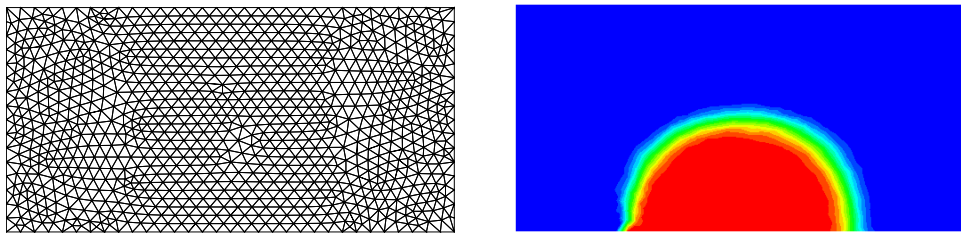


รูปที่ 5.58 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และเส้นชั้นแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาการพาของเนินเขารูปไซน์

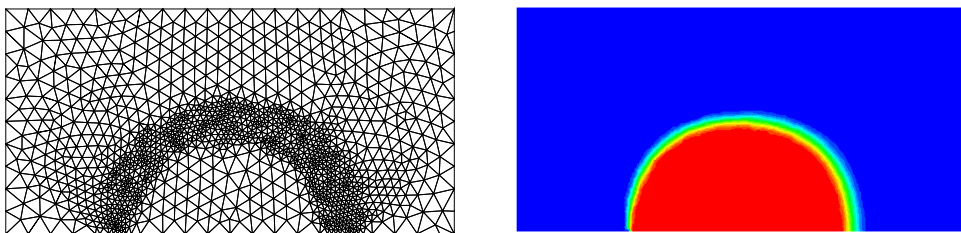
### 5.2.7 ปัญหาของสมิทและฮัตตัน (Smith and Hutton problem)

รูปแบบปัญหาของสมิทและฮัตตันได้อธิบายอยู่ในหัวข้อ 5.1.5 ในการแสดงประสิทธิภาพของเทคนิคการปรับขนาดเมฆโดยอัตโนมัติเริ่มจากแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมขนาดสม่ำเสมอจำนวน 1886 เซลล์วางตัวอย่างไว้ระเหยภายในโดเมน เมื่อนำค่าของ

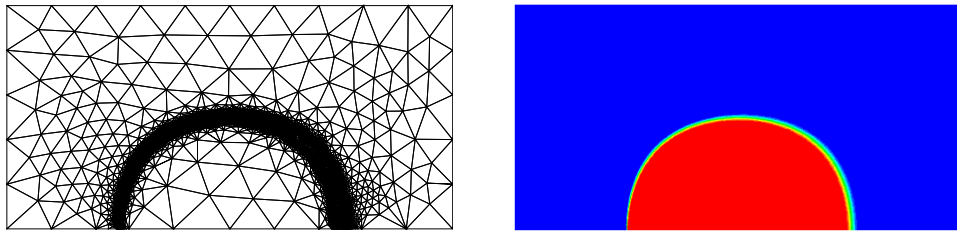
ปริมาณสเกลาร์ที่คำนวณได้จากแบบจำลองนี้มาใช้คำนวณหาขนาดของเซลล์ที่เหมาะสมเพื่อทำการปรับขนาดเมชครั้งที่ 1 จะได้รูปแบบจำลองขนาด 2,612 เซลล์ จากนั้นจึงทำการปรับขนาดเมชครั้งที่ 2 และ 3 จะได้รูปแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมจำนวน 13,071 เซลล์และ 11,197 เซลล์ตามลำดับ รูปที่ 5.59-5.62 แสดงแบบจำลองต่าง ๆ และเส้นชั้นสีแสดงผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์คอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน ผลลัพธ์ที่ทางออกด้านขวาล่างของโดเมนจากการคำนวณเมื่อนำมาพล็อตกราฟเปรียบเทียบกับผลเฉลยแม่นยำตรงแสดงได้ดังรูปที่ 5.63



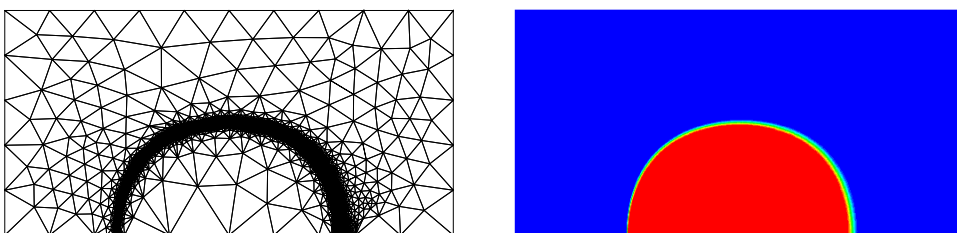
รูปที่ 5.59 แบบจำลองไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์เริ่มแรกและเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาสมิทและฮัตตัน



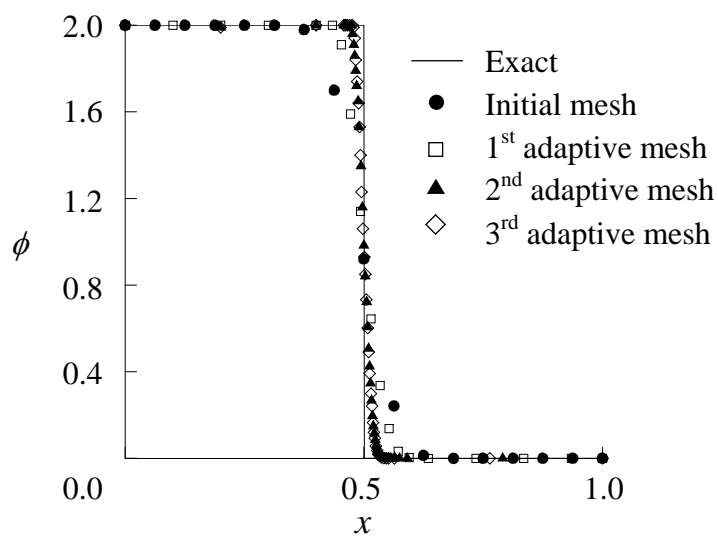
รูปที่ 5.60 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 1 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาสมิทและฮัตตัน



รูปที่ 5.61 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 2 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาสมิทและฮัตตัน



รูปที่ 5.62 แบบจำลองหลังจากทำการปรับขนาดครั้งที่ 3 และเส้นชั้นสีแสดงการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาสมิทและฮัตตัน



รูปที่ 5.63 กราฟเปรียบเทียบการกระจายตัวของปริมาณ  $\phi$  สำหรับปัญหาสมิทและฮัตตัน

## บทที่ 6

### บทสรุป ปัญหาที่พบและข้อเสนอแนะ

การวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาภายใต้สภาวะไม่คงตัวในสองมิติด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้สามารถสรุปประเด็นที่สำคัญ ปัญหาที่พบในระหว่างทำงานวิจัย และข้อเสนอแนะเพื่อการวิจัยต่อไปในอนาคตได้ดังนี้

#### 6.1 บทสรุป

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้นำเสนอระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่เรียกว่าระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์แบบปรับขนาดได้ซึ่งเป็นการผนวกเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเข้ากับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ และนำวิธีการดังกล่าวไปวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาภายใต้สภาวะไม่คงตัวในสองมิติได้อย่างมีประสิทธิภาพ ลดเวลาและหน่วยความจำที่ใช้ในการคำนวณบนเครื่องคอมพิวเตอร์ลงได้มาก เนื้อหาของวิทยานิพนธ์นี้เริ่มจากการกล่าวถึงที่มาและความสำคัญของวิทยานิพนธ์ซึ่งชี้ให้เห็นถึงความสำคัญของการนำระเบียบวิธีเชิงตัวเลขมาวิเคราะห์ปัญหาในรูปแบบต่าง ๆ ตลอดจนงานวิจัยในอดีตที่เกี่ยวข้องในบทที่ 1

ระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเป็นระเบียบวิธีเชิงตัวเลขวิธีหนึ่งที่น่ามาประยุกต์ใช้กับปัญหาที่มีความเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงหรือเกิดความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์ได้เป็นอย่างดี ในขณะที่ระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ให้ผลการคำนวณที่มีความถูกต้องแม่นยำสูง สามารถแก้ปัญหาที่มีความซับซ้อนได้ดีและมีวิธีการคำนวณสอดคล้องกับลักษณะของสมการเอลลิปติก (elliptic equation) ดังนั้นในบทที่ 2 จึงได้กล่าวถึงสมการเชิงอนุพันธ์ย่อยที่เกี่ยวข้องกับการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาภายใต้สภาวะไม่คงตัวในสองมิติ จากนั้นจึงนำเสนอระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ซึ่งนำหลักการของวิธีไฟไนต์วอลุ่มเซลล์เซนเตอร์ (cell-centered finite volume method) มาประยุกต์บนปริมาตรควบคุม (control volume) รูปทรงสามเหลี่ยมย่อย ๆ ภายในโดเมนของปัญหา และใช้หลักการของวิธีการถ่วงน้ำหนักเศษตัก้างในระเบียบวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์ (finite element method) เพื่อคำนวณหาปริมาณเกรเดียนต์ที่อยู่บนผิวควบคุม (control surface) สำหรับพจน์ของการแพร่ การคำนวณผลรวมของฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกปริมาตรควบคุมสามารถคำนวณได้จากผลรวมของฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกที่ตำแหน่งกึ่งกลางพื้นผิวควบคุมทั้งสามที่เวลาครึ่ง



ช่วงเวลา (half time step) เมื่อใช้การกระจายด้วยอนุกรมเทย์เลอร์อันดับสอง (second order Taylor's series expansion) จะทำให้ผลลัพธ์ที่ได้จากระเบียบวิธีนี้มีความถูกต้องถึงอันดับสองระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ที่น่าเสนอนี้เป็นระเบียบวิธีแบบชัดเจนการคำนวณหาผลลัพธ์สามารถทำได้โดยง่ายเนื่องจากไม่ต้องแก้ระบบสมการรวม ในส่วนสุดท้ายของบทนี้ได้นำเสนอการวิเคราะห์หาอันดับความถูกต้องโดยทำการวิเคราะห์บนปริมาตรควบคุม 1 มิติที่มีขนาดเท่ากัน

ขั้นตอนทั้งหมดที่ต้องใช้ในการคำนวณจากวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ในบทที่ 2 จะถูกนำมาประชิดโปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน บทที่ 3 ได้แสดงรายละเอียดของโปรแกรมคอมพิวเตอร์ดังกล่าว ขั้นตอนการทำงานรวมทั้งแสดงตัวอย่างไฟล์ข้อมูลที่ต้องใช้สำหรับวิเคราะห์ปัญหา โปรแกรมคอมพิวเตอร์ได้ถูกเขียนขึ้นด้วยภาษาฟอร์แทรน (FORTRAN) ซึ่งโปรแกรมดังกล่าวมีชื่อว่า (Finite Volume Element Method; FVEM)

การคำนวณหาผลลัพธ์หากต้องการผลลัพธ์ที่มีความถูกต้องสูงจำเป็นต้องใช้เซลล์ที่มีขนาดเล็กเป็นจำนวนมากในการจำลองรูปร่างของปัญหาโดยเฉพาะอย่างยิ่งในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงของผลลัพธ์สูงหรือบริเวณที่เกิดความไม่ต่อเนื่องของผลลัพธ์ แต่การเลือกใช้เซลล์ที่มีขนาดเล็กทั่วทั้งโดเมนของปัญหาจะทำให้ใช้เวลาในการคำนวณรวมถึงสิ้นเปลืองหน่วยความจำบนเครื่องคอมพิวเตอร์โดยไม่จำเป็น จึงนำเสนอเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติเพื่อประยุกต์ใช้ร่วมกับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ในบทที่ 4 โดยอธิบายถึงหลักการของเทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติและรายละเอียดขั้นตอนการใช้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่เกี่ยวข้อง รวมทั้งแสดงตัวอย่างไฟล์ข้อมูลนำเข้าที่จำเป็นต้องใช้กับโปรแกรมนี้

ในบทที่ 5 นำเสนอการใช้ไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประชิดขึ้นมาวิเคราะห์ปัญหาเพื่อตรวจสอบความถูกต้องโดยทำการคำนวณบนโดเมนที่ประกอบด้วยเซลล์สามเหลี่ยมที่มีขนาดเล็กและสม่ำเสมอ ผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์พบว่ามีความสอดคล้องกับผลเฉลยแม่นยำ และมีความถูกต้องมากกว่าเมื่อเปรียบเทียบกับผลลัพธ์จากการคำนวณด้วยวิธีผลต่างอัปวินด์ จากนั้นจึงประยุกต์เทคนิคการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติใช้ร่วมกับระเบียบวิธีดังกล่าวแล้วนำมาวิเคราะห์ปัญหาที่มีผลจากการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสถานะไม่อยู่ตัวที่แตกต่างกัน ผลลัพธ์จากการคำนวณพบว่าหากใช้แบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์ขนาดใหญ่จะเกิดการสั้นของผลลัพธ์อยู่บ้างและเมื่อทำการปรับขนาดเมชในครั้งต่อไปการสั้นนี้จะลดลงตามลำดับ

## 6.2 ปัญหาที่พบในขณะทำวิทยานิพนธ์

ปัญหาที่พบในขณะทำวิทยานิพนธ์นี้คือการทำความเข้าใจทฤษฎีของระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ ขั้นตอนการคำนวณค่าฟลักซ์ที่ผ่านเข้าออกพื้นผิวควบคุม รวมถึงการเลือกใช้วิธีการคำนวณค่าเกรเดียนต์ที่เกิดจากการกระจายด้วยอนุกรมเทย์เลอร์อันดับสอง ซึ่งขั้นตอนทั้งหมดที่กล่าวมาเป็นส่วนสำคัญในการประดิษฐ์โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่สอดคล้องกัน

ในการประดิษฐ์โปรแกรมคอมพิวเตอร์พบว่ามีความยุ่งยากบางประการในการคำนวณค่าของเซลล์ที่มีด้านที่อยู่บนขอบเขตของปัญหา และเนื่องจากระเบียบวิธีที่นำเสนอนี้ต้องการพื้นที่หน่วยความจำสำหรับเก็บข้อมูลที่จำเป็นในการคำนวณทั้งที่ตำแหน่งศูนย์กลางเซลล์ ตำแหน่งเวกเตอร์ และตำแหน่งจุดกึ่งกลางของพื้นผิวควบคุม ทำให้โปรแกรมคอมพิวเตอร์มีขนาดใหญ่และใช้หน่วยความจำในการจัดเก็บข้อมูลสูง

ปัญหาอีกประการหนึ่งที่พบคือการเลือกขนาดของเซลล์ที่เล็กที่สุดในขั้นตอนของการปรับขนาดเมชโดยอัตโนมัติ หากเลือกค่า  $h_{\min}$  น้อยเกินไปในตอนเริ่มแรกของการปรับขนาดจะก่อให้เกิดเซลล์สามเหลี่ยมจำนวนมากส่งผลให้การปรับขนาดครั้งต่อ ๆ ไปเกิดเซลล์สามเหลี่ยมเพิ่มขึ้นอย่างมากและทำให้ใช้เวลาในการคำนวณหาผลลัพธ์เพิ่มขึ้นมากไปด้วย หากเลือกค่า  $h_{\min}$  ที่ใหญ่เกินไปในตอนเริ่มแรกของการปรับขนาดจะทำให้แสดงผลลัพธ์ในบริเวณที่มีการเปลี่ยนแปลงสูงได้ไม่แม่นยำส่งผลให้ต้องทำการปรับขนาดหลายครั้ง ดังนั้นการเลือกค่าที่เหมาะสมจึงเป็นสิ่งที่สำคัญมาก การเลือกค่า  $h_{\min}$  ที่เหมาะสมควรขึ้นกับลักษณะของปัญหาและประสบการณ์ของผู้ทำการวิเคราะห์เป็นหลัก

## 6.3 ข้อเสนอแนะสำหรับงานวิจัยในอนาคต

ในงานวิจัยในอนาคตนั้นสามารถนำพื้นฐานความรู้ที่ได้จากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ไปประยุกต์กับงานวิจัยอื่น ๆ เช่นการวิเคราะห์ปัญหาด้วยระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์บนแบบจำลองที่ประกอบด้วยเซลล์สี่เหลี่ยมแบบไร้ระเบียบ ตลอดจนการวิเคราะห์ปัญหาการพา-การแพร่-การเกิดปฏิกิริยาในสามมิติ

## รายการอ้างอิง

- [1] ปราโมทย์ เดชะอำไพ. ไฟไนต์เอลิเมนต์ในงานวิศวกรรม. พิมพ์ครั้งที่ 4. กรุงเทพมหานคร: สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, 2550.
- [2] Versteeg, H. K., and Malalasekera, W. An introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method. 2<sup>nd</sup> ed. Essex: Pearson Education, 2007.
- [3] Leonard, B. P. Simple high-accuracy resolution program for convective modeling for discontinuities. International Journal for Numerical Methods in Fluids 8 (1988): 1291-1318.
- [4] van Leer, B. Towards the ultimate conservative finite difference scheme, IV, A new approach to numerical convection. Journal of Computational Physics 23 (1977): 276-288.
- [5] Darwish, M. S.; and Moukalled, F. TVD schemes for unstructured grids. International Journal of Heat and Mass Transfer 46 (2003): 599-611.
- [6] Zhao, Y.; and Zhang, B. A high-order characteristics upwind FV method for incompressible flow and heat transfer simulation on unstructured grids. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 190 (2000): 733-756.
- [7] Neofytou, P. A 3rd order upwind finite volume method for generalized Newtonian fluid flows. Advances in Engineering Software 36 (2005): 664-680.
- [8] Lin, R. K.; and Sheu, T. W. H. Application of dispersion-relation-preserving theory to develop a two-dimensional convection-diffusion scheme. Journal of Computational Physics 208 (2005): 493-526.

- [9] Rezgui, A.; Cinnella, P.; and Lerat, A. Third-order accurate finite volume schemes for Euler computations on curvilinear meshes. Computers & Fluids 30 (2001): 875-901.
- [10] Donea, J. A Taylor-Galerkin method for convective transport problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering 20 (1984): 101-119.
- [11] Löhner, R.; Morgan, K.; and Zienkiewicz, O. C. An adaptive finite element procedure for compressible high speed flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 51 (1985): 441-465.
- [12] Ilinca, F.; and Hétu, J. F. A new stabilized finite element method for reaction-diffusion problems: the source-stabilized Petrov-Galerkin method. International Journal for Numerical Methods in Engineering 75 (2008): 1607-1630.
- [13] do Carmo, E. G. D.; and Alvarez, G. B. A new stabilized finite element formulation for scalar convection-diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov-Galerkin method. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 192 (2003): 3379-3396.
- [14] Zienkiewicz, O. C., and Taylor, R. L. The Finite Element Method. 5<sup>th</sup> ed. volume III. Butterworth-Heinemann, 2000.
- [15] Zienkiewicz, O. C.; and Codina R. A general algorithm for compressible and incompressible flow-part I. the split, characteristic-based scheme. International Journal for Numerical Methods in Fluids 20 (1995): 869-885.
- [16] Swaminathan, C. R.; Voller, V. R.; and Patankar, S. V. A streamline upwind control volume finite element method for modeling fluid flow and heat transfer problems. Finite Elements in Analysis and Design 13 (1993): 169-184.

- [17] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. A characteristic-based finite volume element method for convection-diffusion-reaction equation. Transactions of the Canadian Society for Mechanical Engineering 32 (2008): 549-559.
- [18] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. An explicit finite volume element method for solving characteristic level set equation on triangular grids. Acta Mechanica Sinica 27 (2011): 911-921.
- [19] Wang, T. Alternating direction finite volume element methods for 2D parabolic partial equation problems. Numerical methods for Partial Differential Equation 24 (2008): 24-40.
- [20] Zhang, Z.; and Tang, T. Resolving small-scale structures in Boussinesq convection by adaptive grid methods. Journal of Computational and Applied Mathematics 195 (2006): 274-291.
- [21] Dechaumphai, P. Adaptive finite element technique for thermal stress analysis of built-up structures. JSME International Journal 39 (1996): 223-230.
- [22] Chen, T. F.; and Yang, H. D. Numerical construction of optimal adaptive grids in two spatial dimensions. Computers and Mathematics with Applications 39 (2000): 101-120.
- [23] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. Two-dimensional adaptive mesh generation algorithm and its application with higher-order compressible flow solver. KSME International Journal 18 (2004): 2190-2203.
- [24] Jasak, H.; Weller, H. G.; and Gosman, A. D. High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes. International Journal for Numerical Methods in Fluids 31 (1999): 431-449.
- [25] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. Combined finite volume element method for convection-diffusion-reaction equation. Journal of Mechanical Science and Technology 23 (2009): 790-801.

- [26] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. Finite volume element method for convection-diffusion-reaction equation on triangular meshes. International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering 26 (2010): 716-727.
- [27] Côté, J.; Staniforth, A.; and Pudykiewicz, J. Comments on “Smolarkiewicz’s deformational flow” Monthly Weather Review 115 (1986): 894-900.
- [28] Oñate, E.; Zárate, F.; and Idelsohn, R. Finite element formulation for convective-diffusive problems with sharp gradients using finite calculus. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 195 (2006): 1793-1825.
- [29] Codina, R. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 156 (1998): 185-210.
- [30] Phongthanapanich, S.; and Dechaumphai, P. Combined finite volume element method for singularly perturbed reaction-diffusion problems. Applied Mathematics and Computation 209 (2009): 177-185.

ภาคผนวก

## ภาคผนวก ก

### รายละเอียดของโปรแกรม FVEM

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ได้ประดิษฐ์ขึ้นมาเพื่อให้สอดคล้องกับระเบียบวิธีไฟไนต์วอลุ่มเอลิเมนต์ในบทที่ 3 ประกอบด้วยโปรแกรมหลัก (main program) โปรแกรมย่อย (subroutine) จำนวน 14 โปรแกรมและฟังก์ชัน (function) จำนวน 3 โดยมีรายละเอียดดังนี้

```
PROGRAM FVEM
C=====
C      ==                      PROGRAM FVEM                      ==
C      ==Combined Finite Volume and Finite Element method      ==
C      ==Solves 2D Scalar Convection-Diffusion-Reaction Equation ==
C      ==Using Cell-centered Triangular Control Volume          ==
C=====
      IMPLICIT NONE
      INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,mxsid
      PARAMETER (mxvol=131072 ,mxpoi=66094 ,mxbou=2000 ,mxsid=2*mxvol)
      INTEGER nvol ,npoi ,nbou ,nsid ,nstep ,istep
      INTEGER iwrt ,ilim ,iopt ,nwrt ,len ,nc
      INTEGER iv ,ip ,in ,kkk ,NAMLEN
      INTEGER ic(mxpoi)
      INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou) ,vadj(3,mxvol)
      INTEGER side(4,mxsid)
      REAL*8 cfl ,eps ,k ,toler ,time ,dt
      REAL*8 tfin ,tol ,del ,BC
      REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol) ,ai(mxvol)
      REAL*8 gxj(mxpoi) ,gyj(mxpoi) ,dmmat(mxpoi)
      REAL*8 gxi(mxvol) ,gyi(mxvol) ,phij(mxpoi)
      REAL*8 unkn0(mxvol) ,unkn1(mxvol) ,conve(mxvol)
      REAL*8 nx(mxsid) ,ny(mxsid) ,l(mxsid)
      REAL*8 lim(mxvol) ,q(mxvol) ,diffu(mxvol)
      REAL*8 react(mxvol)
      REAL*8 coord(2,mxpoi)
      CHARACTER filnam*12 ,h ,d ,u

      40 WRITE(*,*) 'Please Type Your Input File Name : '
      READ (*,*) filnam
      len = NAMLEN(filnam)
      IF (len.EQ.0) GOTO 40
      OPEN(unit = 10 ,file = filnam(1:len)//'.in' ,err = 40)
      0CALL INPUT (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
      1 ,nstep ,nwrt ,iwrt ,ilim ,iopt ,cfl
      2 ,eps ,k ,q ,toler ,time ,intma
      3 ,coord ,unkn0 ,boun)
C=====
C      ==To Collect Number of Volumes Surrounding Each Node      ==
C=====
      DO 101 ip = 1,npoi
         ic(ip) = 0
101 CONTINUE
      DO 102 iv = 1,nvol
         DO 102 ip = 1,3
```



```

        in      = intma(ip,iv)
        ic(in) = ic(in) + 1
102  CONTINUE
C=====
C  ==To Obtain Area, Position Components of Cell-Center, Adjacent ==
C  ==Volumes Normal Vector, Length and Co-Volume of Cell Sides ==
C=====
      0CALL  GETGEO(mxvol  ,mxpoi  ,mxbou  ,mxsid  ,nvol  ,npoi
1         ,nbou  ,nsid  ,intma  ,coord  ,boun  ,ai
2         ,l  ,xi  ,yi  ,nx  ,ny  ,vadj
3         ,side)
C=====
C  ==To Obtain Inversed Lumped Mass Matrix ==
C=====
      0CALL  GETMAT(mxvol  ,mxpoi  ,nvol  ,npoi  ,intma  ,ai
1         ,dmmat)
C=====
C  ==To Get Time Interval ==
C=====
      0CALL  DTFIX (mxvol  ,mxpoi  ,nvol  ,nstep  ,time  ,cfl
1         ,eps  ,intma  ,coord  ,ai  ,dt  ,tfin)
      nc = 1
C=====
C  ==To Perform Time Step Iteration ==
C=====
      DO 200 istep = 1,nstep
        IF(istep.EQ.nstep) dt = tfin
        CALL CRVEC(gxi  ,mxvol  ,0.0d+00)
        CALL CRVEC(gyi  ,mxvol  ,0.0d+00)

        IF(iopt.EQ.20) THEN
0       CALL GFEM (mxvol  ,mxpoi  ,mxbou  ,nvol  ,npoi  ,nbou
1              ,intma  ,coord  ,boun  ,xi  ,yi  ,ai
2              ,unkn0  ,dmmat  ,gxi  ,gyi  ,gxj  ,gyj)
        ENDIF
        IF(iopt.GT.20) THEN
0       CALL GLSQ (mxvol  ,mxpoi  ,mxbou  ,nvol  ,npoi  ,nbou
1              ,iopt  ,intma  ,coord  ,boun  ,xi  ,yi
2              ,unkn0  ,vadj  ,gxi  ,gyi)
        ENDIF
0       CALL CONV (mxvol  ,mxpoi  ,mxbou  ,mxsid  ,nvol  ,npoi
1              ,nbou  ,nsid  ,iopt  ,ilim  ,intma  ,coord
2              ,unkn0  ,boun  ,vadj  ,side  ,xi  ,yi
3              ,l  ,nx  ,ny  ,dt  ,lim  ,conve
4              ,gxi  ,gyi)
0       CALL DIFF (mxvol  ,mxpoi  ,mxbou  ,nvol  ,npoi  ,nbou
1              ,eps  ,intma  ,coord  ,boun  ,xi  ,yi
2              ,ai  ,unkn0  ,dmmat  ,iopt  ,gxi  ,gyi
3              ,gxj  ,gyj  ,diffu)
0       CALL REAC (mxvol  ,nvol  ,k  ,unkn0  ,xi  ,yi
1              ,dt  ,gxi  ,gyi  ,react)
0       CALL SOLV (mxvol  ,nvol  ,unkn0  ,ai  ,q  ,dt
1              ,conve  ,diffu  ,react  ,unkn1)
C=====
C  ==To Check Convergence of All Unknown Quantities ==
C=====
      tol = 0.
      DO 300 iv = 1,nvol
        del = ABS(unkn1(iv) - unkn0(iv))
        tol = MAX(tol ,del)
300     CONTINUE
      IF(tol.LT.toler) THEN
        GOTO 10
      ELSE

```

```

DO 400 iv = 1,nvol
  unkn0(iv) = unkn1(iv)
400  CONTINUE
    ENDIF
    kkk = MOD(istep ,nwrt)
C=====
C  ==To Write Output File in Case of Time Step = nwrt ==
C=====
    IF((istep.EQ.1).OR.(kkk.EQ.0)) THEN
      WRITE(*,1) istep ,tol
      IF (iwrt.EQ.1) THEN
0 CALL CVERT (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1          ,intma ,boun ,ic ,coord ,unkn1 ,phij)
      CALL FIOUT (nc ,h ,d ,u)
      nc = nc + 1
    ENDIF
200 CONTINUE
C=====
C  ==To Write Final Output File (Both Error Less Than Specified ==
C  ==Tolerance and istep = nstep ==
C=====
10  OCALL CVERT (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
    1          ,intma ,boun ,ic ,coord ,unkn1 ,phij)
    CALL FIOUT (nc ,h ,d ,u)
    IF((tol.LT.toler).OR.(istep.GT.nstep)) WRITE(*,1) istep ,tol
    OPEN(unit=12 ,file=filnam(1:len)//'_ '//h//d//u//'.out' ,err = 40)
    OCALL SOLOP (mxpoi ,nvol ,npoi ,nbou ,nstep ,nwrt
    1          ,iwrt ,ilim ,iopt ,cfl ,eps ,k
    2          ,toler ,time ,coord ,phij)
    CLOSE(12)

1  FORMAT(1x ,i6 ,2x ,e15.6)
    STOP
    END
*****
    OSUBROUTINE INPUT (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
    1          ,nstep ,nwrt ,iwrt ,ilim ,iopt ,cfl
    2          ,eps ,k ,q ,toler ,time ,intma
    3          ,coord ,unkn0 ,boun)
C=====
C  ==To Obtain Nodal connection with Cell-Centered Initial Values, ==
C  ==Coordinates and Boundary Sides ==
C  ==Array : boun = node1 ,node2 ,volume ,boundary option ==
C  ==          : intma = volume vertices ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou ,nstep
    INTEGER nwrt ,iwrt ,ilim ,iopt ,iv ,ip ,ib
    INTEGER i ,j
    INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou)
    REAL*8 cfl ,eps ,k ,toler ,time
    REAL*8 unkn0(mxvol) ,q(mxvol)
    REAL*8 coord(2,mxpoi)
    CHARACTER text*70

    READ(10,1) text
    READ(10,*) nvol ,npoi ,nbou ,nstep ,nwrt ,iwrt ,ilim ,iopt
    READ(10,1) text
    READ(10,*) cfl ,eps ,k ,toler ,time
    READ(10,1) text
    READ(10,1) text
    DO 100 iv = 1,nvol
      READ(10,*) i ,(intma(j,i) ,j = 1,3) ,unkn0(i) ,q(i)

```

```

100 CONTINUE
    READ(10,1) text
    READ(10,1) text
    DO 200 ip = 1,npoi
        READ(10,*) i , (coord(j,i) , j = 1,2)
200 CONTINUE
    READ(10,1) text
    READ(10,1) text
    DO 300 ib = 1,nbou
        READ(10,*) (boun(j,ib) , j = 1,4)
300 CONTINUE
    CLOSE(10)

1 FORMAT(A)

RETURN
END
*****
0SUBROUTINE GETGEO(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,mxsid ,nvol ,npoi
1 ,nbou ,nsid ,intma ,coord ,boun ,ai
2 ,l ,xi ,yi ,nx ,ny ,vadj
3 ,side)
C=====
C ==To Obtain Area, Position Components of Cell-Center, Adjacent ==
C ==Volumes Normal Vector, Length and Co-Volume of Element Sides ==
C ==Array : vadj = Neighbouring Adjacent Cell of Cell i ==
C == : side = node1 ,node2 ,upwind cell ,downwind cell ==
C == (exclude boundary) ==
C == : nx = unit vector in x dir normal to upwind cell ==
C == (exclude boundary) ==
C == : ny = unit vector in y dir normal to upwind cell ==
C == (exclude boundary) ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,mxsid ,nvol ,npoi ,nbou
    INTEGER nsid ,ns ,iv ,ip ,ib ,is ,ic
    INTEGER id ,in ,it ,ip1 ,ip2 ,id1 ,id2 ,in2
    INTEGER ib1 ,ib2 ,ic1 ,ic2 ,id1 ,id2 ,code
    INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou) ,vadj(3,mxvol)
    INTEGER side(4,mxsid)
    REAL*8 mx ,my ,uij ,vij ,udir ,uvel ,vvel
    REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol) ,ai(mxvol)
    REAL*8 nx(mxsid) ,ny(mxsid) ,l(mxsid)
    REAL*8 x(3) ,y(3)
    REAL*8 coord(2,mxpoi)

    ns = 0
    DO 100 iv = 1,nvol
        DO 200 ip = 1,3
            in = intma(ip,iv)
            x(ip) = coord(1,in)
            y(ip) = coord(2,in)
200 CONTINUE
        mx = (x(2) + x(3)) / 2.
        my = (y(2) + y(3)) / 2.
        xi(iv) = MIN(x(1) ,mx) + 2. * ABS(mx - x(1)) / 3.
        yi(iv) = MIN(y(1) ,my) + 2. * ABS(my - y(1)) / 3.
        ai(iv) = x(1)*(y(2)-y(3)) + x(2)*(y(3)-y(1)) + x(3)*(y(1)-y(2))
        ai(iv) = ai(iv) / 2.
        DO 300 is = 1,3
            ip1 = is
            ip2 = ip1 + 1
            IF(ip1.EQ.3) ip2 = 1
            in1 = intma(ip1,iv)

```

```

        in2 = intma(ip2,iv)
C**** To Check Whether Side is Boundary
        DO 400 ib = 1,nbou
            ib1 = boun(1,ib)
            ib2 = boun(2,ib)
            IF((in1.EQ.ib1).AND.(in2.EQ.ib2)) THEN
                vadj(is,iv) = 0
                GOTO 300
            ENDIF
400        CONTINUE
            IF(ns.EQ.0) GOTO 11
C**** To Check Whether Side is Repeated
        DO 500 ic = 1,ns
            ic1 = side(1,ic)
            ic2 = side(2,ic)
            IF((in1.EQ.ic2).AND.(in2.EQ.ic1)) THEN
                code = 0
                GOTO 12
            ENDIF
500        CONTINUE
11        ns = ns + 1
            IF(ns.GT.mxsid) THEN
                WRITE(*,1) ns
                STOP
            ENDIF
            mx      = (coord(1,in1) + coord(1,in2)) / 2.
            my      = (coord(2,in1) + coord(2,in2)) / 2.
            l(ns)   = SQRT((y(ip2)-y(ip1))**2 + (x(ip2)-x(ip1))**2)
            nx(ns)  = (y(ip2) - y(ip1)) / l(ns)
            ny(ns)  = (x(ip1) - x(ip2)) / l(ns)
            uij     = uvel(mx ,my) * nx(ns)
            vij     = vvel(mx ,my) * ny(ns)
            udir    = uij + vij
            side(1,ns) = in1
            side(2,ns) = in2
            code     = 1
C**** To Obtain Internal Adjacent Volume
12        DO 600 id = 1,nvol
            IF (id.NE.iv) THEN
                DO 700 it = 1,3
                    ip1 = it
                    ip2 = it + 1
                    IF(ip1.EQ.3) ip2 = 1
                    id1 = intma(ip1,id)
                    id2 = intma(ip2,id)
                    IF((in1.EQ.id2).AND.(in2.EQ.id1)) THEN
                        vadj(is,iv) = id
                        IF(code.EQ.1) THEN
                            IF(udir.GE.0.) THEN
                                side(3,ns) = iv
                                side(4,ns) = id
                            ELSE
                                side(3,ns) = id
                                side(4,ns) = iv
                                nx(ns)      = -nx(ns)
                                ny(ns)      = -ny(ns)
                            ENDIF
                        ENDIF
                    ENDIF
                    GOTO 300
                ENDIF
700        CONTINUE
            ENDIF
600        CONTINUE
300        CONTINUE

```

```

100 CONTINUE
    nsid = ns

1   FORMAT(' mxsid needs to be increased to :' ,i6)

    RETURN
    END
*****
0SUBROUTINE GETMAT(mxvol ,mxpoi ,nvol ,npoi ,intma ,ai
1   ,dmmat)
C=====
C   ==To Obtain Inverse Lumped Mass Matrix ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,nvol ,npoi ,iv ,ip ,in
    INTEGER intma(3,mxvol)
    REAL*8 ar3
    REAL*8 ai(mxvol) ,dmmat(mxpoi)

    CALL CRVEC(dmmat ,mxpoi ,0.0d+00)
    DO 100 iv = 1,nvol
        ar3 = ai(iv) / 3.
        DO 200 ip = 1,3
            in = intma(ip,iv)
            dmmat(in) = dmmat(in) + ar3
200    CONTINUE
100    CONTINUE
    DO 300 ip = 1,npoi
        dmmat(ip) = 1.0d+00 / dmmat(ip)
300    CONTINUE

    RETURN
    END
*****
0SUBROUTINE DTFIX(mxvol ,mxpoi ,nvol ,nstep ,time ,cfl
1   ,eps ,intma ,coord ,ai ,dt ,tfin)
C=====
C   ==To Obtain Fixed Time Step for All Volumes ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,nvol ,nstep ,iv ,is ,is1
    INTEGER is2 ,n1 ,n2
    INTEGER intma(3,mxvol)
    REAL*8 eps ,cfl ,time ,mxvel ,uvel ,vvel ,hchar
    REAL*8 h ,nvel ,uij ,vij ,dtconv ,mx ,my
    REAL*8 l ,nx ,ny ,dt ,tfin
    REAL*8 ai(mxvol)
    REAL*8 coord(2,mxpoi)

    dt = 1.0E+10
    DO 100 iv = 1,nvol
        mxvel = 0.0
        DO 200 is = 1,3
            is1 = is
            is2 = is1 + 1
            IF(is1.EQ.3) is2 = 1
            n1 = intma(is1,iv)
            n2 = intma(is2,iv)
            mx = (coord(1,n1) + coord(1,n2)) / 2.
            my = (coord(2,n1) + coord(2,n2)) / 2.
0        1 = SQRT((coord(2,n2)-coord(2,n1))**2 +
1            (coord(1,n2)-coord(1,n1))**2)
            nx = (coord(2,n2) - coord(2,n1)) / 1
            ny = (coord(1,n1) - coord(1,n2)) / 1

```

```

        uij = uvel(mx ,my) * nx
        vij = vvel(mx ,my) * ny
        nvel = SQRT((nx * uij)**2 + (ny * vij)**2) * l
        mxvel = MAX(mxvel ,nvel)
200    CONTINUE
        dtconv = ai(iv) / mxvel
        dt = MIN(dt ,dtconv)
100    CONTINUE
        dt = cfl * dt
        nstep = INT(time / dt) + 1
        tfin = MOD(time ,dt)

        RETURN
        END
*****
0SUBROUTINE GFEM (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1          ,intma ,coord ,boun ,xi ,yi ,ai
2          ,unkn0 ,dmmat ,gxi ,gyi ,gxj ,gyj)
C=====
C    ==To Calculate Gradient Reconstruction Using FEM Method ==
C=====
        IMPLICIT NONE
        INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou ,iv
        INTEGER ip ,is ,ib ,in ,is1 ,is2 ,is3
        INTEGER in1 ,in2 ,ib1 ,ib2 ,n1 ,n2 ,n3
        INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou)
        INTEGER n(3)
        REAL*8 x2 ,x3 ,y2 ,y3 ,a ,b ,c
        REAL*8 nn ,l ,nx ,ny
        REAL*8 unkn0(mxvol) ,gxi(mxvol) ,gyi(mxvol)
        REAL*8 dmmat(mxpoi) ,gxj(mxpoi) ,gyj(mxpoi)
        REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol) ,ai(mxvol)
        REAL*8 x(3) ,y(3)
        REAL*8 coord(2,mxpoi)

        CALL CRVEC(gxj ,mxpoi ,0.0d+00)
        CALL CRVEC(gyj ,mxpoi ,0.0d+00)
        DO 100 iv = 1,nvol
            DO 200 ip = 1,3
                n(ip) = intma(ip,iv)
                x(ip) = coord(1,n(ip))
                y(ip) = coord(2,n(ip))
200        CONTINUE
            DO 300 is = 1,3
                is1 = is
                is2 = is1 + 1
                IF(is1.EQ.3) is2 = 1
                is3 = is2 + 1
                IF(is2.EQ.3) is3 = 1
                in1 = n(is1)
                in2 = n(is2)
                gxj(in1) = gxj(in1) - (y(is2) - y(is3)) * unkn0(iv) / 2.
                gyj(in1) = gyj(in1) - (x(is3) - x(is2)) * unkn0(iv) / 2.
                DO 400 ib = 1,nbou
                    ib1 = boun(1,ib)
                    ib2 = boun(2,ib)
                    IF((in1.EQ.ib1).AND.(in2.EQ.ib2)) THEN
                        l = SQRT((y(is2)-y(is1))**2. + (x(is2)-x(is1))**2.)
                        nx = (y(is2) - y(is1)) / l
                        ny = (x(is1) - x(is2)) / l
                        gxj(in1) = gxj(in1) + nx * l * unkn0(iv) / 2.
                        gxj(in2) = gxj(in2) + nx * l * unkn0(iv) / 2.
                        gyj(in1) = gyj(in1) + ny * l * unkn0(iv) / 2.
                        gyj(in2) = gyj(in2) + ny * l * unkn0(iv) / 2.

```

```

                                ENDIF
400      CONTINUE
300      CONTINUE
100     CONTINUE
      DO 500 ip = 1,npoi
          gxj(ip) = gxj(ip) * dmmat(ip)
          gyj(ip) = gyj(ip) * dmmat(ip)
500     CONTINUE
      DO 600 iv = 1,nvol
          DO 600 is = 1,3
              is1 = is
              is2 = is1 + 1
              IF(is1.EQ.3) is2 = 1
              is3 = is2 + 1
              IF(is2.EQ.3) is3 = 1
              n1 = intma(is1,iv)
              n2 = intma(is2,iv)
              n3 = intma(is3,iv)
              a = coord(1,n2) * coord(2,n3) - coord(1,n3) * coord(2,n2)
              b = coord(2,n2) - coord(2,n3)
              c = coord(1,n3) - coord(1,n2)
              nn = (a + b * xi(iv) + c * yi(iv)) / (2. * ai(iv))
              gxi(iv) = gxi(iv) + nn * gxj(n1)
              gyi(iv) = gyi(iv) + nn * gyj(n1)
600     CONTINUE

      RETURN
      END
*****
      OSUBROUTINE GLSQ (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1          ,iopt ,intma ,coord ,boun ,xi ,yi
2          ,unkn0 ,vadj ,gxi ,gyi)
C=====
C      ==To Calculate Gradient Reconstruction Using LSQ Method      ==
C=====
      IMPLICIT NONE
      INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou ,iopt
      INTEGER iv0 ,is0 ,is1 ,nb1 ,nb2
      INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou) ,vadj(3,mxvol)
      REAL*8 a11 ,a12 ,a13 ,a14 ,a15 ,a22 ,a23
      REAL*8 a24 ,a25 ,a33 ,a34 ,a35 ,a44 ,a45
      REAL*8 a55 ,b1 ,b2 ,b3 ,b4 ,b5 ,dphi
      REAL*8 deta1 ,deta2 ,deta3 ,deta4 ,deta5 ,deta ,dx
      REAL*8 dy
      REAL*8 unkn0(mxvol) ,gxi(mxvol) ,gyi(mxvol)
      REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol)
      REAL*8 coord(2,mxpoi)

      DO 100 iv0 = 1,nvol
          a11 = 0.0d+00
          a12 = 0.0d+00
          a22 = 0.0d+00
          b1 = 0.0d+00
          b2 = 0.0d+00
          DO 200 is0 = 1,3
C**** To obtain equation system from 1st adjacent volume
              nb1 = vadj(is0,iv0)
              IF(nb1.EQ.0) THEN
0                  CALL BOUND(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1                      ,intma ,coord ,unkn0 ,boun ,xi ,yi
2                      ,is0 ,iv0 ,dx ,dy ,dphi)
              ELSE
                  dx = xi(nb1) - xi(iv0)
                  dy = yi(nb1) - yi(iv0)

```

```

        dphi = unkn0(nb1) - unkn0(iv0)
    ENDIF
    a11 = a11 + dx * dx
    a12 = a12 + dx * dy
    a22 = a22 + dy * dy
    b1 = b1 + dx * dphi
    b2 = b2 + dy * dphi
C**** To obtain equation system from 2nd adjacent volume
    IF(iopt.NE.21) THEN
        IF(nb1.NE.0) THEN
            DO 300 is1 = 1,3
                nb2 = vadj(is1,nb1)
                IF(nb2.NE.iv0) THEN
                    IF(nb2.EQ.0) THEN
0CALL BOUND(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvoul ,npoi ,nbou
1          ,intma ,coord ,unkn0 ,boun ,xi ,yi
2          ,is1 ,nb1 ,nb1 ,dx ,dy ,dphi)
                    ELSE
                        dx = xi(nb2) - xi(iv0)
                        dy = yi(nb2) - yi(iv0)
                        dphi = unkn0(nb2) - unkn0(iv0)
                    ENDIF
                    a11 = a11 + dx * dx
                    a12 = a12 + dx * dy
                    a22 = a22 + dy * dy
                    b1 = b1 + dx * dphi
                    b2 = b2 + dy * dphi
                ENDIF
300          CONTINUE
            ENDIF
        ENDIF
200    CONTINUE
    deta1 = b1*a22 - b2*a12
    deta2 = b2*a11 - b1*a12
    deta = a11*a22 - a12*a12
    IF(deta.EQ.0.) THEN
        WRITE(*,99) iv0
        STOP
    ENDIF
    gxi(iv0) = deta1 / deta
    gyi(iv0) = deta2 / deta
100  CONTINUE

99  FORMAT(' determinant of volume',i5,'=0')

RETURN
END
*****
0SUBROUTINE BOUND(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvoul ,npoi ,nbou
1          ,intma ,coord ,unkn0 ,boun ,xi ,yi
2          ,is ,iv ,dx ,dy ,dphi)
C=====
C  ==To Calculate Mirror Node Adjacent to Boundary ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvoul ,npoi ,nbou ,nsid
    INTEGER is ,iv ,ib ,ip1 ,ip2 ,in1 ,in2
    INTEGER ib1 ,ib2 ,code
    INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou)
    REAL*8 dx ,dy ,dphi ,x1 ,x2 ,y1 ,y2
    REAL*8 mx ,my ,phia ,BC
    REAL*8 unkn0(mxvol) ,xi(mxvol) ,yi(mxvol)
    REAL*8 coord(2,mxpoi)

```



```

    ip1 = is
    ip2 = is + 1
    IF(ip1.EQ.3) ip2 = 1
    in1 = intma(ip1,iv)
    in2 = intma(ip2,iv)
    x1 = coord(1,in1)
    x2 = coord(1,in2)
    y1 = coord(2,in1)
    y2 = coord(2,in2)
    mx = (x1 + x2) / 2.
    my = (y1 + y2) / 2.
    dx = 2.*(mx - xi(iv))
    dy = 2.*(my - yi(iv))
    DO 100 ib = 1,nbou
        ib1 = boun(1,ib)
        ib2 = boun(2,ib)
        IF((in1.EQ.ib1).AND.(in2.EQ.ib2)) THEN
            code = boun(4,ib)
            GOTO 110
        ENDIF
    100 CONTINUE
    110 IF(code.EQ.1) THEN
        phia = BC(mx ,my)
        dphi = 2.*(phia - unkn0(iv))
    ELSE
        dphi = 0.0d+00
    ENDIF

    RETURN
    END
*****
0SUBROUTINE CONV (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,mxsid ,nvol ,npoi
1 ,nbou ,nsid ,iopt ,ilim ,intma ,coord
2 ,unkn0 ,boun ,vadj ,side ,xi ,yi
3 ,l ,nx ,ny ,dt ,lim ,conve
4 ,gxi ,gyi)
C=====
C ==To Calculate Contribution Due to Convective Fluxes ==
C=====
    IMPLICIT NONE
    INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,mxsid ,nvol ,nbou ,nsid
    INTEGER ilim ,iopt ,vol ,iv ,id ,is ,ib
    INTEGER is1 ,is2 ,in1 ,in2 ,v1 ,v2 ,code
    INTEGER npoi
    INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou) ,side(4,mxsid)
    INTEGER vadj(3,mxvol)
    REAL*8 dt ,tasp ,tati ,phiii ,phiiij ,phijj ,alfa
    REAL*8 umax ,umin ,xx ,yy ,ui ,vi ,uij
    REAL*8 vij ,uvel ,vvel ,mx ,my ,nxx ,nyy
    REAL*8 ll ,BC ,udir ,cflux ,dx ,dy ,dphi
    REAL*8 gxi(mxvol) ,gyi(mxvol) ,unkn0(mxvol)
    REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol) ,conve(mxvol)
    REAL*8 lim(mxvol) ,limf(3) ,l(mxsid)
    REAL*8 nx(mxsid) ,ny(mxsid)
    REAL*8 coord(2,mxpoi) ,inf(3,mxbou)

    CALL CRVEC(conve ,mxvol ,0.0d+00)
    CALL CRVEC(lim ,mxvol ,1.0d+00)
    IF(ilim.EQ.0) GOTO 11
C**** To Obtain Flux Limiter Function on Each Cell
    DO 100 iv = 1,nvol
        umax = -1.0E+06
        umin = 1.0E+06
        phiii = unkn0(iv)

```

```

DO 200 is = 1,3
  id = vadj(is,iv)
  IF(id.EQ.0) THEN
0     CALL BOUND(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1         ,intma ,coord ,unkn0 ,boun ,xi ,yi
2         ,is ,iv ,dx ,dy ,dphi)
    phijj = dphi + unkn0(iv)
  ELSE
    phijj = unkn0(id)
  ENDIF
  umax = MAX(phiii ,phijj ,umax)
  umin = MIN(phiii ,phijj ,umin)
200 CONTINUE
CALL CRVEC(limf ,3 ,1.0d+00)
DO 300 is = 1,3
  is1 = is
  is2 = is1 + 1
  IF(is1.EQ.3) is2 = 1
  in1 = intma(is1,iv)
  in2 = intma(is2,iv)
  mx = (coord(1,in1) + coord(1,in2)) / 2.
  my = (coord(2,in1) + coord(2,in2)) / 2.
  id = vadj(is,iv)
  phiii = unkn0(iv)
0     ll = SQRT((coord(2,in2)-coord(2,in1))**2 +
1         (coord(1,in2)-coord(1,in1))**2)
  nxx = (coord(2,in2) - coord(2,in1)) / ll
  nyy = (coord(1,in1) - coord(1,in2)) / ll
  uij = uvel(mx ,my) * nxx
  vij = vvel(mx ,my) * nyy
  udir = uij + vij
  IF(id.EQ.0) THEN
0     CALL BOUND(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1         ,intma ,coord ,unkn0 ,boun ,xi ,yi
2         ,is ,iv ,dx ,dy ,dphi)
    phiiij = (dphi + 2.* unkn0(iv)) / 2.
  ELSE
    IF(udir.GE.0.) vol = iv
    IF(udir.LT.0.) vol = id
    xx = xi(vol)
    yy = yi(vol)
    ui = uvel(xx ,yy)
    vi = vvel(xx ,yy)
    dx = mx - xx
    dy = my - yy
    tasp = dx*gxi(vol) + dy*gyi(vol)
    tati = dt*(ui*gxi(vol)+vi*gyi(vol))/2.
    phiiij = unkn0(vol) + tasp - tati
  ENDIF
  CALL LIMIT(umax ,umin ,phiii ,phiiij ,alfa)
  limf(is) = alfa
300 CONTINUE
lim(iv) = MIN(limf(1) ,limf(2) ,limf(3))
100 CONTINUE
C**** To Obtain Internal Convective Flux
11 DO 400 is = 1,nsid
  in1 = side(1,is)
  in2 = side(2,is)
  v1 = side(3,is)
  v2 = side(4,is)
  mx = (coord(1,in1) + coord(1,in2)) / 2.
  my = (coord(2,in1) + coord(2,in2)) / 2.
  uij = uvel(mx ,my)
  vij = vvel(mx ,my)

```

```

xx      = xi(v1)
yy      = yi(v1)
ui      = uvel(xx ,yy)
vi      = vvel(xx ,yy)
dx      = mx - xx
dy      = my - yy
tasp    = lim(v1) * (dx * gxi(v1) + dy * gyi(v1))
tati    = lim(v1) * dt * (ui * gxi(v1) + vi * gyi(v1)) / 2.
phiiij = unkn0(v1) + tasp - tati
cflux   = l(is) * phiiij * (nx(is) * uij + ny(is) * vij)
conve(v1) = conve(v1) + cflux
conve(v2) = conve(v2) - cflux
400 CONTINUE
C**** To Obtain Boundary Convective Flux
DO 500 ib = 1,nbou
  in1    = boun(1,ib)
  in2    = boun(2,ib)
  v1     = boun(3,ib)
          code = boun(4,ib)
          mx   = (coord(1,in1) + coord(1,in2)) / 2.
          my   = (coord(2,in1) + coord(2,in2)) / 2.
          xx   = xi(v1)
          yy   = yi(v1)
          uij  = uvel(mx ,my)
          vij  = vvel(mx ,my)
0  ll    = SQRT((coord(2,in2)-coord(2,in1))**2 +
1         (coord(1,in2)-coord(1,in1))**2)
  nxx    = (coord(2,in2) - coord(2,in1)) / ll
  nyy    = (coord(1,in1) - coord(1,in2)) / ll
  IF(code.EQ.1) THEN
    phiiij = BC(mx ,my)
  ELSE
    udir   = uij * nxx + vij * nyy
    IF(udir.GE.0.) THEN
      tasp  = lim(v1)*((mx-xx) * gxi(v1) + (my-yy) * gyi(v1))
      tati  = lim(v1)*((ui * gxi(v1) + vi * gyi(v1))) * dt/2.
      phiiij = unkn0(v1) + tasp - tati
    ELSE
      phiiij = unkn0(v1)
    ENDIF
  ENDIF
  cflux   = ll * phiiij * (nxx * uij + nyy * vij)
  conve(v1) = conve(v1) + cflux
500 CONTINUE

RETURN
END
*****
SUBROUTINE LIMIT(umax ,umin ,phiii ,phiiij ,alfa)
C=====
C ==To Calculate Slope Limiter ==
C=====
IMPLICIT NONE
REAL*8 umax ,umin ,phiii ,phiiij ,alfa

IF(phiiij.GT.umax) THEN
  alfa = (umax - phiii) / (phiiij - phiii)
ELSE
  IF(phiiij.LT.umin) THEN
    alfa = (umin - phiii) / (phiiij - phiii)
  ELSE
    alfa = 1.
  ENDIF
ENDIF
ENDIF

```

```

      RETURN
      END
*****
      OSUBROUTINE DIFF (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1          ,eps ,intma ,coord ,boun ,xi ,yi
2          ,ai ,unkn0 ,dmmat ,iopt ,gxi ,gyi
3          ,gxj ,gyj ,diffu)
C=====
C ==To Calculate Contribution Due to Diffusive Fluxes ==
C=====
      IMPLICIT NONE
      INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou ,iopt
      INTEGER iv ,is ,is1 ,is2 ,n1 ,n2
      INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou)
      REAL*8 eps ,gxij ,gyij ,x1 ,x2 ,y1 ,y2
      REAL*8 l ,nx ,ny
      REAL*8 xi(mxvol) ,yi(mxvol) ,ai(mxvol)
      REAL*8 unk0(mxvol) ,dmmat(mxpoi) ,gxi(mxvol)
      REAL*8 gyi(mxvol) ,gxj(mxpoi) ,gyj(mxpoi)
      REAL*8 diffu(mxvol)
      REAL*8 coord(2,mxpoi)

      CALL CRVEC(diffu ,mxvol ,0.0d+00)
      IF(eps.GT.0.) THEN
        IF(iopt.NE.20) THEN
0          CALL GFEM (mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1              ,intma ,coord ,boun ,xi ,yi ,ai
2              ,unkn0 ,dmmat ,gxi ,gyi ,gxj ,gyj)
          ENDIF
          DO 100 iv = 1,nvol
            DO 100 is = 1,3
              is1 = is
              is2 = is + 1
              IF(is1.EQ.3) is2 = 1
              n1 = intma(is1,iv)
              n2 = intma(is2,iv)
              x1 = coord(1,n1)
              x2 = coord(1,n2)
              y1 = coord(2,n1)
              y2 = coord(2,n2)
              l = SQRT((y2-y1)**2 + (x2-x1)**2)
              nx = (y2 - y1) / l
              ny = (x1 - x2) / l
              gxij = (gxj(n1) + gxj(n2)) / 2.
              gyij = (gyj(n1) + gyj(n2)) / 2.
              diffu(iv) = diffu(iv) + l * eps * (nx * gxij + ny * gyij)
100          CONTINUE
            ENDDO
          ENDDO
        ENDIF
      ENDIF
      RETURN
      END
*****
      OSUBROUTINE REAC (mxvol ,nvol ,k ,unkn0 ,xi ,yi
1          ,dt ,gxi ,gyi ,react)
C=====
C ==To Calculate Contribution Due to Reaction ==
C=====
      IMPLICIT NONE
      INTEGER mxvol ,nvol ,iv
      REAL*8 k ,dt ,xx ,yy ,UVEL ,VVEL ,ui
      REAL*8 vi
      REAL*8 unk0(mxvol) ,xi(mxvol) ,yi(mxvol)
      REAL*8 gxi(mxvol) ,gyi(mxvol) ,react(mxvol)

```

```

CALL CRVEC(react ,mxvol ,0.0d+00)
IF(k.GT.0.) THEN
  DO 100 iv = 1,nvol
    xx = xi(iv)
    yy = yi(iv)
    ui = UVEL(xx ,yy)
    vi = VVEL(xx ,yy)
    react(iv) = dt * (ui*gxi(iv) + vi*gyi(iv)) / 2.
    react(iv) = k * (unkn0(iv) - react(iv))
100  CONTINUE
  ENDDIF

  RETURN
  END
*****
0SUBROUTINE SOLV (mxvol ,nvol ,unkn0 ,ai ,q ,delt
1 ,conve ,diffu ,react ,unkn1)
C=====
C ==To Update unknown quantities at time N+1 ==
C=====
  IMPLICIT NONE
  INTEGER mxvol ,nvol ,iv
  REAL*8 delT
  REAL*8 unkn0(mxvol) ,unkn1(mxvol) ,ai(mxvol)
  REAL*8 conve(mxvol) ,diffu(mxvol) ,react(mxvol)
  REAL*8 q(mxvol)

  DO 100 iv = 1,nvol
    unkn1(iv) = unkn0(iv) - delT * (conve(iv) - diffu(iv)) /ai(iv)
    unkn1(iv) = unkn1(iv) - delT * (react(iv) - q(iv))
100  CONTINUE

  RETURN
  END
*****
0SUBROUTINE CVERT(mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou
1 ,intma ,boun ,ic ,coord ,unkn1 ,phij)
C=====
C ==To Average Cell-Centered Solution to Each Node ==
C=====
  IMPLICIT NONE
  INTEGER mxvol ,mxpoi ,mxbou ,nvol ,npoi ,nbou ,iv
  INTEGER ip ,ib ,in ,is ,code
  INTEGER ic(mxpoi)
  INTEGER intma(3,mxvol) ,boun(4,mxbou)
  REAL*8 roff ,value ,xx ,yy ,BC
  REAL*8 unkn1(mxvol) ,phij(mxpoi)
  REAL*8 coord(2,mxpoi)

  CALL CRVEC(phij ,mxpoi ,0.0d+00)
  DO 100 iv = 1,nvol
    DO 100 ip = 1,3
      in = intma(ip,iv)
      phij(in) = phij(in) + unkn1(iv)
100  CONTINUE
    DO 200 ip = 1,npoi
      phij(ip) = phij(ip) / ic(ip)
200  CONTINUE
    DO 300 ib = 1,nbou
      code = boun(4,ib)
      IF(code.EQ.1) THEN
        DO 400 is = 1,2
          in = boun(is,ib)

```

```

                xx      = coord(1,in)
                yy      = coord(2,in)
                phij(in) = BC(xx,yy)
400      CONTINUE
          ENDIF
300      CONTINUE
        roff = 1.0E-06
        DO 500 ip = 1,npoi
          value = ABS(phij(ip))
          IF(value.LT.roff) phij(ip) = 0.0d+00
500      CONTINUE

        RETURN
        END
*****
      SUBROUTINE FIOUT(nc      ,h      ,d      ,u)
C=====
C      ==To Sequence Output File Name(Transient Option)      ==
C=====
      IMPLICIT  NONE
      INTEGER   nc      ,num1      ,num2      ,num3      ,hun      ,dec      ,uni
      CHARACTER h      ,d      ,u

      num1 = INT(nc / 100)
      IF(num1.GT.9) THEN
        WRITE(*,*) ' Too Many Output Files'
        STOP
      ENDIF
      hun = 048 + num1
      h   = CHAR(hun)
      num2 = INT(nc / 10)
      IF(num2.GT.9) num2 = MOD(num2 ,10)
      dec = 048 + num2
      d   = CHAR(dec)
      num3 = nc - (num1 * 100) - (num2 * 10)
      uni = 048 + num3
      u   = CHAR(uni)

      RETURN
      END
*****
      SUBROUTINE CRVEC(vec      ,nvec      ,val)
C=====
C      ==To Initializes a Vector of Real Variables with "val"      ==
C=====
      IMPLICIT  NONE
      INTEGER   ii      ,nvec
      REAL*8    val
      REAL*8    vec(nvec)

      DO 100 ii = 1,nvec
        vec(ii) = val
100      CONTINUE

      RETURN
      END
*****
      0SUBROUTINE SOLOP(mxpoi      ,nvol      ,npoi      ,nbou      ,nstep
1      ,nwrt      ,iwrt      ,ilim      ,iopt      ,cfl
2      ,eps      ,k      ,toler      ,time      ,coord
3      ,phij)
C=====
C      == To Send Final Output file(.out)      ==
C=====

```

```

      IMPLICIT      NONE
      INTEGER      mxpoi ,nvol ,npoi ,nbou ,nstep ,nwrt
      INTEGER      iwrt ,ilim ,iopt ,ip
      REAL*8       cfl ,eps ,k ,toler ,time
      REAL*8       phi j(mxpoi)
      REAL*8       coord(2,mxpoi)
      CHARACTER    A*40

      OWRITE(12,*) '   nvol   npoi   nbou   nstep   nwrite   iwrt   ilim
1  iopt'
      OWRITE(12,1)   nvol ,npoi ,nbou ,nstep ,nwrt ,iwrt ,ilim
1,iopt
      OWRITE(12,*) '   cfl           eps           k           toler
1   time'
      OWRITE(12,2)   cfl           ,eps           ,k           ,toler
1   ,time
      OWRITE(12,*) '   node   x-coordinates   y-coordinates
1   solution'
      DO 100 ip = 1,npoi
          WRITE(12,3) ip ,coord(1,ip) ,coord(2,ip) ,phi j(ip)
100  CONTINUE

      1  FORMAT(1x,3(1x ,i6) ,2(2x ,i6) ,3x ,i6 ,2x ,i4 ,1x ,i6)
      2  FORMAT(2x,F6.3 ,1x ,e13.6 ,2x ,F6.3 ,1x ,e14.6 ,1x ,e15.6)
      3  FORMAT(2x,i6 ,3(2x ,e15.6))

      RETURN
      END
*****
      FUNCTION UVEL(xx ,yy)
      REAL*8   xx ,yy ,uvel
      uvel = 1.
      RETURN
      END
*****
      FUNCTION VVEL(xx ,yy)
      REAL*8   xx ,yy ,vvel
      vvel = 0.
      RETURN
      END
*****
      FUNCTION BC(xi ,yi)
      REAL*8   xi ,yi ,BC
      bc = -TANH(yi/2.)
      RETURN
      END
*****
      FUNCTION NAMLEN(filnam)
C=====
C   ==To Count The Number of Characters from The Input File Name   ==
C=====
      CHARACTER filnam*12
      NAMLEN = 0
      DO 100 i = 12 ,1 , -1
          IF(filnam(i:i).EQ.' ') GOTO 100
          NAMLEN = i
          GOTO 200
100  CONTINUE

200  RETURN
      END
*****
C=====END OF PROGRAM=====

```

## ภาคผนวก ข

### รายละเอียดของโปรแกรม FEM\_FVE

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FEM\_FVE มีรายละเอียดดังนี้

```
PROGRAM FEM_FVE
C=====
C      ==                               FEM_FVE                               ==
C      ==Program Transfer Data from FEMESH File(.dat) to Input FVEM          ==
C      ==File(.in)                                                            ==
C      ==Transfer Constraint ID = 1 to 1, Specified Fixed Boundary            ==
C      ==                               = 2 to 0, Outflow Free Boundary      ==
C=====
      IMPLICIT      NONE
      INTEGER      mxvol      ,mxpoi      ,mxbou
      PARAMETER (mxvol=131072 ,mxpoi=66049 ,mxbou=1024)
      INTEGER      nvol      ,npoi      ,in      ,i      ,j      ,ip      ,iv
      INTEGER      ipp      ,nstep      ,nwrt      ,l      ,namlen ,nbou ,ib
      INTEGER      iopt      ,iwrt      ,ilim      ,m
      INTEGER      intma(3,mxvol) ,isido(4,mxbou) ,nc(mxpoi)
      REAL*8      xi      ,yi      ,ic      ,cfl      ,eps      ,k      ,q
      REAL*8      toler      ,time      ,pi
      REAL*8      x(3)      ,y(3)      ,unkn0(mxvol)
      REAL*8      load(mxpoi)
      REAL*8      mx(3,mxvol)      ,my(3,mxvol)      ,coord(2,mxpoi)
      CHARACTER   filnam*20      ,n*12      ,v*13      ,b*14
C=====
C      ==To Read Input Data from FEMESH (.dat)                                ==
C=====
      40  WRITE(*,*) 'Please Enter Your Input File Name : '
          READ (*,*) filnam
          l = namlen(filnam)
          IF(l.EQ.0) GOTO 40
          OPEN(unit = 10 ,file = filnam(1:l)//'.dat' ,err = 40)
          OPEN(unit = 12 ,file = filnam(1:l)//'.in' ,err = 40)
          DO 100 i = 1,32
              READ(10,*)
100  CONTINUE
          READ(10,5) v ,nvol
          IF(nvol.GT.mxvol) THEN
              WRITE(*,1) nvol
              STOP
          ENDIF
          READ(10,5) n ,npoi
          IF(npoi.GT.mxpoi) THEN
              WRITE(*,2) npoi
              STOP
          ENDIF
          READ(10,5) b ,nbou
          IF(nbou.GT.mxbou) THEN
              WRITE(*,1) nbou
              STOP
          ENDIF
          DO 200 i = 1,6
```



```

        READ(10,*)
200  CONTINUE
      DO 300 i = 1,npoi
        READ(10,*) ip ,(coord(j,ip) ,j = 1,2)
        IF(ip.NE.i) THEN
          WRITE(*,3) i
          STOP
        ENDIF
300  CONTINUE
      READ(10,*)
      DO 400 i = 1,nvol
        READ(10,*) iv ,(intma(j,iv) ,j = 1,3)
        IF(iv.NE.i) THEN
          WRITE(*,4) i
          STOP
        ENDIF
400  CONTINUE
      DO 500 i = 1,npoi+2
        READ(10,*)
500  CONTINUE
      DO 600 i = 1,nbou
        READ(10,*) (isido(j,i) ,j = 1,4)
600  CONTINUE
      CLOSE(10)

      1  FORMAT(' mxvol needs to be increased to :' ,i6)
      2  FORMAT(' mxpoi needs to be increased to :' ,i6)
      3  FORMAT(' vol no.' ,i6 , ' in data file is missing')
      4  FORMAT(' node no.' ,i6 , ' in data file is missing')
      5  FORMAT(A ,i6)
C=====
C   ==To Set Initial Scalar Quantities and Boundary Conditions   ==
C=====
      DO 101 iv = 1,nvol
        DO 102 ip = 1,3
          in      = intma(ip,iv)
          x(ip)   = coord(1,in)
          y(ip)   = coord(2,in)
102  CONTINUE
        DO 103 ip = 1,3
          ipp     = ip + 1
          IF(ip.EQ.3) ipp = 1
          mx(ip,iv) = (x(ip) + x(ipp))/2.
          my(ip,iv) = (y(ip) + y(ipp))/2.
103  CONTINUE
          xi      = MIN(x(1) ,mx(2,iv)) + 2.*ABS(mx(2,iv) - x(1))/3.
          yi      = MIN(y(1) ,my(2,iv)) + 2.*ABS(my(2,iv) - y(1))/3.
          unkn0(iv) = IC(xi,yi)
101  CONTINUE
      DO 110 ib = 1,nbou
        i = isido(4,ib)
        IF(i.EQ.2) isido(4,ib) = 0
110  CONTINUE
C=====
C   ==To Transfer Data to Input File of FVEM Program (.in)   ==
C=====
      nstep = 10000
      nwrt  = 10000
      iwrt  = 100
      iopt  = 1
      ilim  = 1
      cfl   = 1.0
      eps   = 0.0
      k     = 0.0

```

```

q      = 0.0
toler  = 1.0E-06
pi     = 4.* ATAN(1.)
time   = 1.5

0WRITE(12,*) ' nvol      npoi      nbou      nstep      nwrt      iwrt
1 ilim      iopt'
0WRITE(12,10) nvol      ,npoi      ,nbou      ,nstep      ,nwrt      ,iwrt
1,ilim      ,iopt
WRITE(12,*) ' cfl      eps      k      toler      time
WRITE(12,11) cfl      ,eps      ,k      ,toler      ,time
0WRITE(12,15) ' Volume Nodal Connection and Initial Condition[
1 ,nvol ,']:'
WRITE(12,*) ' volume node1 node2 node3 initial value      q'
DO 700 iv = 1,nvol
WRITE(12,12) iv ,(intma(j,iv) ,j = 1,3) ,unkn0(iv) ,q(iv)
700 CONTINUE
WRITE(12,15) ' Cell-Center Coordinates[' ,npoi ,']:'
WRITE(12,*) ' node x-coordinates y-coordinates'
DO 800 ip = 1,npoi
WRITE(12,13) ip ,(coord(j,ip) ,j = 1,2)
800 CONTINUE
WRITE(12,15) ' Boundary Sides[' ,nbou ,']:'
WRITE(12,*) ' node1 node2 volume type'
DO 900 ib = 1,nbou
WRITE(12,16) (isido(j,ib), j = 1,4)
900 CONTINUE

CLOSE(12)

10 FORMAT(I6 ,2(2X ,I6) ,2(3X,I6) ,3(2X ,I6))
11 FORMAT(1X ,F5.3 ,2(2X ,F6.4) ,3X ,F6.4 , 2X ,E7.1,2X,E14.6)
12 FORMAT(1X ,I6 ,3(2X ,I6) ,2(2X ,E14.6))
13 FORMAT(1X ,I6 ,2(2X ,E14.6))
14 FORMAT(I5 ,1X ,2(2X ,E14.6) ,2X ,3(1X ,E14.6) ,2X ,3(1X ,E14.6))
15 FORMAT( A ,I6 ,A)
16 FORMAT(1X ,I6 ,3(2X ,I6))

STOP
END
*****
FUNCTION IC(xi ,yi)
REAL*8 xi ,yi ,IC

IC = 0.

RETURN
END
*****
FUNCTION namlen(fil)
CHARACTER fil*20

namlen = 0
DO 100 i = 20,1,-1
IF(fil(i:i).EQ.' ') GOTO 100
namlen = i
GOTO 200
100 CONTINUE

200 RETURN
END
*****
C=====END OF PROGRAM=====C

```

## ภาคผนวก ค

### รายละเอียดของโปรแกรม FVE\_FEM

โปรแกรมคอมพิวเตอร์ FVE\_FEM มีรายละเอียดดังนี้

```
PROGRAM FVE_FEM
C=====
C ==                                FVE_FEM                                ==
C ==Program Transfer Data from FVEM File(.out) to Input FEMESH ==
C ==File(.out) ==
C=====
      IMPLICIT NONE
      INTEGER mxpoi
      PARAMETER (mxpoi=66049)
      INTEGER npoi ,in ,i ,ip ,l ,k
      INTEGER namlen
      REAL*8 zero ,del ,err
      REAL*8 unkn0(mxvol) ,unkn1(mxpoi)
      CHARACTER text*40 ,name1*20 ,name2*20
C=====
C ==To Read Input Data from FVEM (.out)and FEMESH (.out) ==
C=====
      40 WRITE(*,*) 'Please Enter FVEM File Name : '
         READ (*,*) name1
      50 WRITE(*,*) 'Please Enter FEMESH File Name : '
         READ (*,*) name2
         l = namlen(name1)
         IF(l.EQ.0) GOTO 40
         k = namlen(name2)
         IF(k.EQ.0) GOTO 50

         OPEN(unit = 10 ,file = name1(1:l)//'.out' ,err = 40)
         OPEN(unit = 11 ,file = name2(1:l)//'.out' ,err = 50)
         OPEN(unit = 12 ,file = name1(1:l)//'.out' ,err = 40)
         READ(10,*)
         READ(10,*) in ,npoi
         IF(npoi.GT.mxpoi) THEN
            WRITE(*,1) npoi
            STOP
         ENDIF
         READ(10,*)
         READ(10,*)
         READ(10,*)
         DO 100 i = 1,npoi
            READ(10,*) ip ,unkn1(ip)
100 CONTINUE
         DO 200 i = 1.30
            READ (11,2) text
            WRITE(12,2) text
200 CONTINUE
         READ(11,*)
         READ(11,*)
         DO 300 ip = 1,npoi
            READ(11,*) i ,del ,del ,unkn0(i)
```

```

300 CONTINUE
  1 FORMAT(' mxpoi needs to be increased to :' ,i6)
  2 FORMAT(5A40)
  CLOSE(10)
  CLOSE(11)

C*****to check different output

      del = 0.0d+00
      DO 400 ip = 1,npoi
        del = del + ((unkn1(ip)-unkn0(ip)) * (unkn1(ip)-unkn0(ip)))
400 CONTINUE
      del = SQRT(del)
      err = del / npoi
      WRITE(*,3) err
  3 FORMAT(' average error = ' ,e15.6)

C*****to prepare data for FEMESH adaptive model (.out)

      zero = 0.0d+00
      WRITE(12,*)
      WRITE(12,4)
      DO 500 ip = 1,npoi
        WRITE(12,5) ip ,unkn1(ip) , unkn1(ip) ,unkn1(ip) ,zero
500 CONTINUE
  4 0FORMAT('      NODE          U          V          P'
  1      '          H')
  5 FORMAT(1x ,i6 ,1x ,4(2x ,e15.6))
  CLOSE(12)

      STOP
      END
*****
      FUNCTION namlen(fil)
      CHARACTER filnam*20

      namlen = 0
      DO 100 i = 20,1,-1
        IF(filnam(i:i).EQ.' ') GOTO 100
        namlen = i
        GOTO 200
100 CONTINUE

200 RETURN
      END
*****
C=====END OF PROGRAM=====C

```

## ภาคผนวก ง

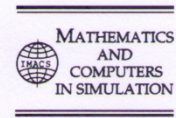
### บทความ Solving convection-diffusion-reaction equation by adaptive finite volume element method



Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)



Mathematics and Computers in Simulation 82 (2011) 220–233



[www.elsevier.com/locate/matcom](http://www.elsevier.com/locate/matcom)

### Solving convection-diffusion-reaction equation by adaptive finite volume element method

P. Theeraek<sup>a</sup>, S. Phongthanapanich<sup>b</sup>, P. Dechaumphai<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Chulalongkorn University, Patumwan, Bangkok 10330, Thailand

<sup>b</sup> Department of Mechanical Engineering Technology, College of Industrial Technology, King Mongkut's University of Technology North Bangkok, Bangkok 10800, Thailand

Received 16 August 2010; received in revised form 17 March 2011; accepted 7 June 2011  
Available online 12 July 2011

#### Abstract

A finite volume element method is combined with an adaptive meshing technique to solve the two-dimensional unsteady convection-diffusion-reaction equation. The finite volume method is used to derive the discretized equations while concept of the finite element technique is applied to determine the gradient quantities at cell faces. Second-order accuracy in both space and time are achieved by applying the Taylor's series expansion along the local characteristic lines. An adaptive meshing technique is applied to further improve the solution accuracy, and to minimize the computational time and computer memory requirement. The efficiency of the adaptive finite volume element method is evaluated by the examples of pure-convection, convection-diffusion, convection-reaction, and diffusion-reaction problems.

© 2011 IMACS. Published by Elsevier B.V. All rights reserved.

*Keywords:* Convection-diffusion-reaction equation; Finite volume element method; Adaptive meshing technique

#### 1. Introduction

Numerical simulation for predicting the transport phenomena governed by the unsteady convection-diffusion-reaction equation is difficult due to the convection term. The flow behaviors usually contain steep gradients that require special treatment of numerical schemes. Most of the classical schemes suffer from the spurious oscillations, otherwise yield excessive numerical dispersion [9,20]. During the past decade, several stabilizing schemes have been developed for solving such equation. These schemes include the upwind-based methods [11,13], the characteristic Galerkin method [4,21], the Galerkin projected residual method [3], the improved stabilization parameter on the Petrov–Galerkin method and on the multiscale method [7,19], the Taylor–Galerkin algorithm [14], etc. The upwind-based methods have been employed widely for analyzing strongly convective flow. The characteristics Galerkin method based on the Taylor's series expansion is an attractive one due to its simple implementation that can be written in a fully explicit form for obtaining solution. Other schemes with high-resolution have also been investigated such as those proposed in Refs. [8,10,12]. At present, development of new numerical schemes for accurate solution of the convection-diffusion-reaction equation is still needed.

\* Corresponding author. Tel.: +66 2 218 6621; fax: +66 2 218 6621.  
E-mail address: [fmepdc@eng.chula.ac.th](mailto:fmepdc@eng.chula.ac.th) (P. Dechaumphai).



Computational techniques for solving the hyperbolic equation are generally classified into the explicit and implicit (or semi-implicit) methods. The explicit method is popular because it is simple and requires less computational effort. However, the method is constrained by the CFL condition in order to stabilize the spatial error from growing without bound. On the other hand, the implicit method provides more stable solution but a large time step may not be used because the solution accuracy degrades with time. The inversion of the coefficient matrix is another weakness of the latter method since it is a time consumable process. Furthermore, a large block of memory is required for the coefficient matrix formation.

In this paper, the finite volume element method [17,18] is further investigated and presented. A cell-centered finite volume method is used to discretize the two-dimensional unsteady convection-diffusion-reaction equation on triangular meshes. The midpoint quadrature is applied for both the spatial and temporal flux integral terms, while second-order accurate unknown quantities at the cell faces are determined by using the Taylor's series expansion. An explicit scheme is achieved by expanding the temporal gradient along the local characteristics and using the finite element concept to determine the gradient quantities at the cell faces. An adaptive meshing technique is implemented to further improve the solution accuracy by refining meshes in the region of high solution gradients. Coarse meshes are constructed in the other regions to reduce the computational time and computer memory. The presentation of this paper starts from the explanation of the theoretical formulation and adaptive meshing technique in Sections 2–4, respectively. Performance of the combined method is examined by using five examples. These examples are: (1) mixing of hot with cold front, (2) boundary layer flow, (3) oblique inflow convection-reaction, (4) corner layer problem, and (5) triangular wave flow problem.

## 2. Governing equation and finite volume element formulation

The governing equation for the two-dimensional unsteady convection-diffusion-reaction equation is,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\vec{v}\phi - \epsilon \vec{\nabla}\phi) + \kappa\phi = q \quad (1)$$

where  $\phi$  is the unknown scalar quantity,  $\vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j}$  is the given convective velocity,  $\epsilon \geq 0$  is the diffusivity parameter,  $\kappa$  is the reaction coefficient, and  $q = q(\vec{x}, t)$  is the prescribed source term. Eq. (1) is defined for the spatial domain  $\vec{x} \in \Omega$  where  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  and the time interval of  $t \in (0, T)$  with  $T > 0$ . The initial condition is given by  $\phi(\vec{x}, 0) = \phi_0(\vec{x})$ .

The finite volume element technique is proposed herein for solving the unsteady convection-diffusion-reaction equation. The discretization is based on the cell-centered method for which the non-overlapping triangular control volumes,  $\Omega_i \in \Omega$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ , are placed over the computational domain such that  $\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega_i$ ,  $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ , if  $i \neq j$ . The governing equation is subject to the boundary conditions

$$\phi = g_D \quad \text{on} \quad \partial\Omega_D, \quad (2a)$$

$$\epsilon \frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} = g_N \quad \text{on} \quad \partial\Omega_N \quad (2b)$$

with  $\partial\Omega = \partial\Omega_D \cup \partial\Omega_N$  and  $\partial\Omega_D \cap \partial\Omega_N = \emptyset$ . Eq. (1) is integrated over the control volume  $\Omega_i$  and in the time interval  $(t^n, t^{n+1})$  as,

$$\int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} + \vec{v} \cdot (\vec{v}\phi - \epsilon \vec{\nabla}\phi) + \kappa\phi - q \right) dt d\vec{x} = 0 \quad (3)$$

The approximations to the cell average of  $\phi$  over control volume  $\Omega_i$  at time  $t^n$  and  $t^{n+1}$  are represented by,

$$\phi_i^n = \frac{1}{\text{meas}(\Omega_i)} \int_{\Omega_i} \phi(\vec{x}, t^n) d\vec{x}, \quad (4a)$$

and

$$\phi_i^{n+1} = \frac{1}{\text{meas}(\Omega_i)} \int_{\Omega_i} \phi(\vec{x}, t^{n+1}) d\vec{x} \quad (4b)$$



where  $meas(\Omega_i)$  is the area of cell  $i$ . Temporal integration of the transient term and application of the divergence theorem for the convection-diffusion term yield,

$$\begin{aligned} \phi_i^{n+1} = & \phi_i^n - \frac{1}{meas(\Omega_i)} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega_i} \bar{n}_i(\nu) \cdot [\bar{v}(\nu)\phi(\bar{x}, t) - \epsilon \bar{\nabla}\phi(\nu, t)] d\nu dt \\ & - \frac{1}{meas(\Omega_i)} \left[ \int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \kappa \phi(\bar{x}, t) dt d\bar{x} - \int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} q(\bar{x}, t) dt d\bar{x} \right] \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\bar{n}_i(\nu)$  is the outward unit normal vector to the cell face,  $\partial\Omega_i$ .

For an arbitrary triangular control volume, the flux integral over  $\partial\Omega_i$  appearing on the right-hand side of Eq. (5) could be approximated by summation of the fluxes passing through the three adjacent cell faces. By applying the midpoint quadrature integration rule for both the spatial and temporal domains, the flux integral over  $\partial\Omega_i$  in Eq. (5) is approximated by,

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\partial\Omega_i} \bar{n}_i(\nu) \cdot [\bar{v}(\nu)\phi(\bar{x}, t) - \epsilon \bar{\nabla}\phi(\nu, t)] d\nu dt = \Delta t \sum_{j=1}^3 |\Gamma_{ij}| \bar{n}_{ij} \cdot [\bar{v}_{ij}\phi_{ij}(t^{n+1/2}) - \epsilon \bar{\nabla}\phi_{ij}(t^{n+1/2})] \quad (6)$$

where subscript  $ij$  indicates the quantity evaluated at midpoint of the cell face between the two adjacent cells,  $\Omega_i$  and  $\Omega_j$ . The segment of boundary,  $\Gamma_{ij}$ , is defined by  $\partial\Omega_i = \bigcup_{j=1}^3 \Gamma_{ij}$  and  $\Gamma_{ij} = \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j$ . The velocity vector,  $\bar{v}_{ij}$ , and the unknown quantity at the half time step,  $\phi_{ij}(t^{n+1/2})$ , are also evaluated at midpoint of each cell face. It should be noted that, for simplicity,  $\bar{\nabla}\phi_{ij}(t^{n+1/2})$  is approximated by  $\bar{\nabla}\phi_{ij}(t^n)$  throughout this paper.

Integration of the reaction and source terms could be approximated by the cell average over the control volume and the midpoint quadrature integration rule in time domain as,

$$\int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \kappa \phi(\bar{x}, t) dt d\bar{x} = meas(\Omega_i) \Delta t \kappa \phi_i(t^{n+1/2}) \quad (7)$$

$$\int_{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} q(\bar{x}, t) dt d\bar{x} = meas(\Omega_i) \Delta t q_i(t^{n+1/2}) \quad (8)$$

By substituting Eqs. (6)–(8) into Eq. (5), an explicit finite volume scheme for solving Eq. (1) is obtained as,

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{\Delta t}{meas(\Omega_i)} \left[ \sum_{j=1}^3 |\Gamma_{ij}| \bar{n}_{ij} \cdot (\bar{v}_{ij}\phi_{ij}^{n+1/2} - \epsilon \bar{\nabla}\phi_{ij}^n) \right] - \Delta t (\kappa \phi_i^{n+1/2} - q_i^{n+1/2}) \quad (9)$$

where the quantities at time  $t^{n+1/2}$  are defined by  $\phi_{ij}^{n+1/2} = \phi_{ij}(t^{n+1/2})$ ,  $\phi_i^{n+1/2} = \phi_i(t^{n+1/2})$ , and  $q_i^{n+1/2} = q_i(t^{n+1/2})$ . The gradient quantity at time  $t^n$  is defined by  $\bar{\nabla}\phi_{ij}^n = \bar{\nabla}_{ij}\phi(t^n)$ . The quantities at the half time step,  $\phi_{ij}^{n+1/2}$  and  $\phi_i^{n+1/2}$ , are of second-order and approximated by applying Taylor's series expansion as,

$$\phi_{ij}^{n+1/2} = \phi_i^n + (\bar{x}_{ij} - \bar{x}_i) \cdot \bar{\nabla}\phi_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial\phi_i^n}{\partial t} \quad (10)$$

$$\phi_i^{n+1/2} = \phi_i^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial\phi_i^n}{\partial t} \quad (11)$$

To obtain an explicit scheme, the temporal derivative terms in Eqs. (10) and (11) are determined by using the concept of local expansion of the unknown along its characteristics. Hence, the reconstruction of transport quantities according to the upwind direction can be written as,

$$\phi_{ij}^{n+1/2} = \begin{cases} \phi_i^n + (\bar{x}_{ij} - \bar{x}_i) \cdot \bar{\nabla}\phi_i^n - \frac{\Delta t}{2} (\bar{v}_i \cdot \bar{\nabla}\phi_i^n), & \bar{v}_{ij} \cdot \bar{n}_{ij} \geq 0 \\ \phi_j^n + (\bar{x}_{ij} - \bar{x}_j) \cdot \bar{\nabla}\phi_j^n - \frac{\Delta t}{2} (\bar{v}_j \cdot \bar{\nabla}\phi_j^n), & \bar{v}_{ij} \cdot \bar{n}_{ij} < 0 \end{cases} \quad (12)$$

$$\phi_i^{n+1/2} = \begin{cases} \phi_i^n - \frac{\Delta t}{2}(\vec{v}_i \cdot \vec{\nabla} \phi_i^n), \vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} \geq 0 \\ \phi_j^n - \frac{\Delta t}{2}(\vec{v}_j \cdot \vec{\nabla} \phi_j^n), \vec{v}_{ij} \cdot \vec{n}_{ij} < 0 \end{cases} \quad (13)$$

In this paper, the concept of finite element method is applied to determine the gradient quantities. The gradient at the center of control volume,  $\vec{\nabla} \phi_i^n$ , is determined by the weighted residuals method [6,22] and is assumed to be linearly distributed over cell  $\Omega_i$ ,

$$\vec{\nabla} \phi_i^n = \sum_{k=1}^3 N_k(\vec{x}) \vec{\nabla} \phi_k^n \quad (14)$$

where  $N_k(\vec{x})$  denotes the linear interpolation functions for the triangular cell and  $k = 1, 2, 3$  represent the control volume vertices. By applying the standard Galerkin method and the Gauss's theorem to Eq. (14), the gradient quantities at a grid point are obtained as,

$$\vec{\nabla} \phi_{J,i}^n = M^{-1} \left[ \int_{\partial \Omega_i} \vec{n}_i(\nu) N_J(\nu) \phi_i^n d\nu - \int_{\Omega_i} \frac{\partial N_J(\nu)}{\partial \vec{x}} \phi_i^n d\vec{x} \right] \quad (15)$$

where  $M$  is the lumped mass matrix and  $\vec{\nabla} \phi_{J,i}^n$  are the contributions of the gradient quantities in the control volume  $\Omega_i$  to the gradient quantities at the grid point  $J$ . In order to determine the total gradient quantities at the grid point  $J$ , Eq. (15) is applied to all the volumes surrounding it such that,

$$\vec{\nabla} \phi_J^n = \sum_{i=1}^{NV} \vec{\nabla} \phi_{J,i}^n \quad (16)$$

where  $NV$  is the number of the surrounding triangular cells. The gradient quantities at the cell faces,  $\vec{\nabla} \phi_{ij}^n$ , is then computed by applying the midpoint quadrature integration rule along the edge that connects grid points  $I$  and  $J$ .

To ensure the stability of an explicit scheme on a triangular mesh, the CFL-like stability criterion must be fulfilled. In this paper, the permissible time step within each cell is determined from

$$\Delta t = C \min_i \left( \frac{(meas(\Omega_i))^{1/2}}{\max_{j=1,2,3} |\vec{v}_{n,ij}|}, \frac{|\Gamma_i^c|^2}{2\epsilon} \right) \quad (17)$$

where  $\vec{v}_{n,ij}$  is the normal velocity at  $\Gamma_{ij}$ ,  $\Gamma_i^c$  is the characteristic length of cell  $i$ , and  $0 < C \leq 1$ .

### 3. One-dimensional numerical analysis

In this section, a numerical analysis of the one-dimensional homogeneous convection-diffusion equation is presented. For simplicity, the order of accuracy and stability of the explicit numerical scheme given by Eq. (18) will be analyzed on a uniform one-dimensional grid cell,  $meas(\Omega_i) = \Delta x$ . The one-dimensional homogeneous convection-diffusion equation is

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( a\phi - \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) = 0 \quad (18)$$

where  $a$  is a given velocity. The numerical equation for the  $i$ th cell,  $meas(\Omega_i) \in (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$ , may be written as

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{a\Delta t}{\Delta x} (\phi_{i+1/2}^n - \phi_{i-1/2}^n) + \frac{\epsilon\Delta t}{\Delta x} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i+1/2}^n - \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i-1/2}^n \right) \quad (19)$$

By using the one-dimensional linear interpolation function, the gradient quantities at the cell faces  $i - 1/2$  and  $i + 1/2$  are

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{i-1/2}^n = \frac{1}{\Delta x} (\phi_i^n - \phi_{i-1}^n) \quad (20a)$$



$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i+1/2}^n = \frac{1}{\Delta x} (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n) \quad (20b)$$

Similarly, the gradient quantity at cell-centered of  $|\Omega_i|$  is

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i^n = \frac{1}{2\Delta x} (\phi_{i+1}^n - \phi_{i-1}^n) \quad (21)$$

By substituting these expressions into the right-hand side of Eq. (19)

$$\phi_i^{n+1} = \phi_i^n - \frac{R}{4} (\phi_{i+1}^n + 3\phi_i^n - 5\phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) + \frac{R^2}{4} (\phi_{i+1}^n - \phi_i^n - \phi_{i-1}^n + \phi_{i-2}^n) + r (\phi_{i+1}^n - 2\phi_i^n + \phi_{i-1}^n) \quad (22)$$

where  $R = (a\Delta t)/(\Delta x)$  and  $r = (\epsilon\Delta t)/(\Delta x)^2$ , are the cell Courant number and the cell diffusion parameter, respectively. The truncation error analysis by using the Taylor series expansion on Eq. (22) at  $(x_n, t^n) = (i, n)$  shows that the accuracy is of order  $O(\Delta t^2, \Delta t\Delta x, \Delta x^2)$ .

To analyze the stability of the numerical scheme, the discrete Fourier transform is applied to Eq. (22), term by term, to obtain the amplification factor  $G(\theta)$  as

$$G(\theta) = \frac{\hat{\phi}^{n+1}}{\hat{\phi}^n} = \left[ 1 - R(\cos(\theta) - 1)^2 - \frac{R^2}{2} \sin^2(\theta) + 2r(\cos(\theta) - 1) \right] - I(R \sin(\theta)) \left[ (3 - \cos(\theta)) - \frac{R}{2}(1 - \cos(\theta)) \right] \quad (23)$$

where  $\theta$  is a phase angle. For a stable solution, the modulus of  $G(\theta)$  must be bounded for all values of  $\theta$  ( $|G(\theta)|^2 \leq 1$ ), i.e.,

$$|G(\theta)|^2 = (\cos(\theta) - 1) \left[ \left( \frac{R^2}{2} - 2R^3 + 2R^2r \right) (\cos^2(\theta) - 1) + R^2(2\cos^2(\theta) + \cos(\theta) - 9) - 4Rr(\cos(\theta) - 1)^2 + (4r^2 - 2R)(\cos(\theta) - 1) + 4r \right] + 1 \quad (24)$$

By differentiating Eq. (24) with respect to  $\theta$  and setting the derivative to be zero, the critical points are at  $\theta = 0, \pm\pi$ . The values of  $|G(\theta)|$  at these points are

$$\begin{aligned} |G(0)| &= 1 \\ |G(\pm\pi)| &= |4(R+r) - 1| \end{aligned} \quad (25)$$

For  $|G(\pm\pi)|$  to be bounded by one, the numerical scheme is conditionally stable when  $0 \leq R+r \leq (1/2)$ . Such condition implies that  $|G(\theta)| \leq 1 + C\Delta t$ , where  $C > 0$ . The numerical scheme satisfies the von Neumann condition, thus the scheme is stable. However, it should be noted that the stability condition is restrictive. The CFL-like condition as described by Eq. (17), which is obtained by applying the discrete Fourier transform to the convection and diffusion parts separately, is stable with a large time step. Such stability condition has been tested by using many numerical examples as will be presented in the following section.

To ensure that the proposed explicit scheme converges and does not produce global oscillation, the time step is determined from the CFL condition given by Eq. (17). In addition, to reduce the local oscillation, the upwind technique according to Eq. (10) is used for discretizing the convection term. By following the one-dimensional analysis above, an implicit diffusion term  $((a^2\Delta t)/2)((\partial^2\phi)/(\partial x^2))$  is generated which is essential for the upwind scheme. However, some local oscillations still remain because the Taylor's series is used to formulate the higher-order reconstruction of the unknown quantities at the cell faces. To eliminate such oscillation, a less accurate solution is obtained by writing the unknown quantities at the cell faces as  $\phi_{ij} = \phi_i$ .

#### 4. Adaptive meshing technique

The concept of the adaptive meshing technique is to generate an entirely new mesh based on the solution obtained from an earlier mesh [5,15]. The new mesh consists of small elements in the regions with large change in solution gradients and larger elements in the other regions where the changes in solution gradients are small. The adaptive meshing procedure employed in this paper is based on the advancing front technique for which the grid points are firstly generated along the outer domain boundary. Triangular elements are then constructed from these grid points and gradually propagate into the domain interior. The mesh construction is complete when the domain interior is fulfilled with all triangular elements. To determine proper element sizes at different locations in the flow field, the solid-mechanics concept for finding the principal stresses from a given state of stresses at a point is employed. The second derivatives of the unknown quantity  $\phi$  with respect to global coordinates  $\bar{x}$  can be computed in the principal directions  $\bar{X}$  as,

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \phi}{\partial X^2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 \phi}{\partial Y^2} \end{bmatrix} \quad (26)$$

The second derivatives of the unknown quantity  $\phi$  with respect to coordinates  $\bar{x}$  are determined by using the concept of weighted residuals. For example, to determine  $(\partial^2 \phi)/(\partial x^2)$ , the computed solution  $\phi_i$ , is assumed to vary linearly over cell  $\Omega_i$  as

$$\phi_i = \sum_{k=1}^3 N_k(\bar{x}) \phi_k \quad (27)$$

where  $N_k(\bar{x})$  denotes the linear interpolation functions for the triangular cell and  $k=1, 2, 3$  are the control volume vertices. By applying the standard Galerkin method, the first derivative can be derived and determined from,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{J,i} = M^{-1} \int_{\Omega_i} N_J d\bar{x} \left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_i \quad (28)$$

where  $M$  is the lumped mass matrix and  $((\partial \phi)/(\partial x))|_{J,i}$  is the contribution of the first derivative quantity at the grid point  $J$ . By applying the same procedure, the second derivative is,

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{J,i} = M^{-1} \int_{\Omega_i} N_J d\bar{x} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_i \quad (29)$$

Then, the second derivative at the grid point  $J$  is determined from,

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_J = \sum_{i=1}^{NV} \left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{J,i} \quad (30)$$

where  $NV$  is the number of the surrounding triangular cells.

The second derivatives are used to determine the proper element sizes,  $h_i$ ,  $i=1, 2$  in the two principal directions using condition,

$$h_i^2 \lambda_i = h_{\min}^2 \lambda_{\max} = \text{constant} \quad (31)$$

where  $\lambda_i$ ,  $i=1, 2$  is the second derivatives of the unknown quantity in the two principal directions of the element considered.  $\lambda_{\max} = \max(|(\partial^2 \phi)/(\partial X^2)|, |(\partial^2 \phi)/(\partial Y^2)|)$  is the maximum principal quantity for the entire model.

Based on the above condition, the element sizes are generated according to the given minimum element size  $h_{\min}$ . Specifying too small  $h_{\min}$  may result in a model with an excessive number of elements. On the other hand, specifying too large  $h_{\min}$  may result in an inadequate solution accuracy. These factors must be considered prior to generating a new mesh.



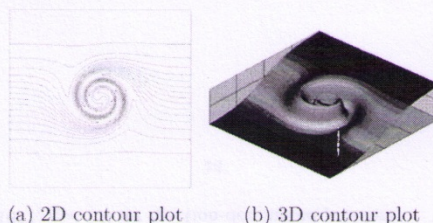


Fig. 1. Exact solution of the mixing of hot with cold front. (a) 2D contour plot and (b) 3D contour plot.

## 5. Numerical examples

To evaluate the performance of the finite volume element method and to demonstrate the solution improvement after combining it with the adaptive meshing technique, five examples of pure-convection, convection-diffusion, convection-reaction and diffusion-reaction problems are performed. These examples are: (1) mixing of hot with cold front, (2) boundary layer flow, (3) oblique inflow convection-reaction, (4) corner layer problem, and (5) triangular wave flow problem.

### 5.1. Mixing of hot with cold front

The first example is a pure-convection problem of a mixing of hot with cold front [16]. The computational domain is  $\Omega = (-4, 4) \times (-4, 4)$  and an initially straight frontal zone is given by,

$$\phi_0(\vec{x}) = -\tanh\left(\frac{y}{2}\right) \quad (32)$$

the velocity field is defined as,

$$\vec{v} = -\frac{y}{r} \frac{f_t}{f_{\max}} \vec{i} + \frac{x}{r} \frac{f_t}{f_{\max}} \vec{j} \quad (33)$$

where  $r \equiv \sqrt{x^2 + y^2}$  is the distance from the origin of the coordinate system,  $f_{\max} = 0.385$  is the maximum tangential velocity, and  $f_t = (\tanh(r))/(\cosh^2(r))$ . The problem is examined until the final time step is equal to 4. The exact solution is shown by the two- and three-dimensional contour plots in Fig. 1(a) and (b).

The computation is initially performed by using an unstructured mesh consisting of 884 uniform triangular cells. The initial and adaptive meshes with their computed solutions at the final time are shown by the two- and three-dimensional contour plots in Fig. 2(a)–(d), respectively. The element size used in the initial mesh is 0.4. The maximum and minimum element sizes of the third adaptive mesh are 1.0 and 0.004, respectively. The figures show that spurious oscillations decrease as the meshes are refined. The exact and computed solutions obtained from the third adaptive mesh are found to be good agreement.

### 5.2. Boundary layer flow

The second example is a convection-diffusion problem for determining the behavior of the boundary layer flow in a square domain  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$  [2]. The initial condition  $\phi_0(\vec{x})$  is set to be zero and the velocity field is given by  $\vec{v} = 1\vec{i}$ . The small diffusion coefficient is specified as  $\epsilon = 10^{-10}$  with the source term of  $q = 1$ .

The test case is performed until the final time step is equal to 2. The computation starts from using an unstructured mesh with 884 uniform triangular cells (20 cells along each boundary). Fig. 3(a)–(d) show the initial and adaptive meshes with their computed solutions at the final time by using the three-dimensional contour plots. The maximum and minimum element sizes of the third adaptive mesh are 0.1 and 0.002. Oscillation of the solution obtained from the coarse initial mesh occurs along the edge of the profile. This oscillation disappears after the second mesh adaptation.



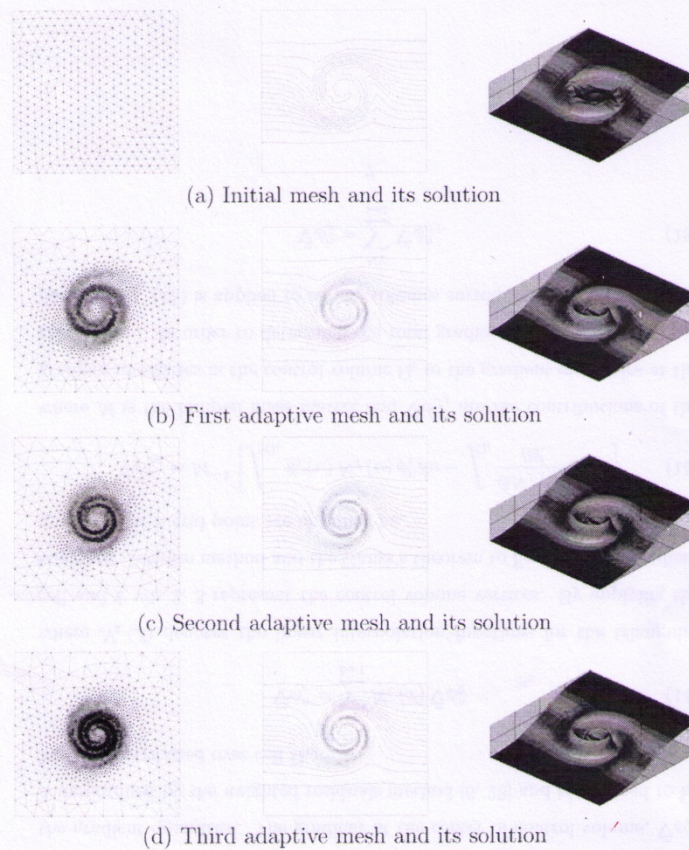


Fig. 2. Adaptive meshes and their computed solutions for the mixing of hot with cold front. (a) Initial mesh and its solution, (b) first adaptive mesh and its solution, (c) second adaptive mesh and its solution, and (d) third adaptive mesh and its solution.

### 5.3. Oblique inflow convection-reaction

The third example is an oblique inflow convection-reaction problem [16]. The computational domain is a unit square of  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ , and the initial condition  $\phi_0(\vec{x})$  is set to be zero. The source term,  $q$ , is given as a constant of 1. The steady velocity field is given in the form,

$$\vec{v} = V \cos\left(\frac{\pi}{3}\right) \vec{i} + V \sin\left(\frac{\pi}{3}\right) \vec{j} \quad (34)$$

Two different cases have been considered corresponding to dominant convection and reaction, respectively. These cases are:

- (a)  $V = 1.0$ ,  $\kappa = 10^{-4}$  for convection-dominated problem, and



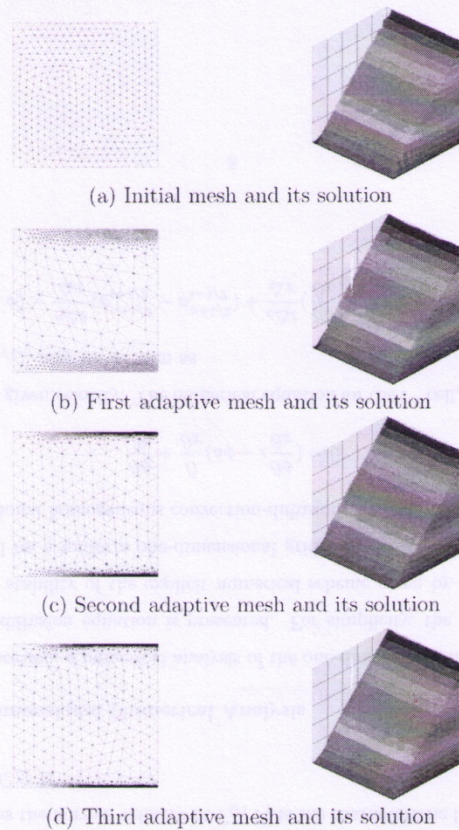
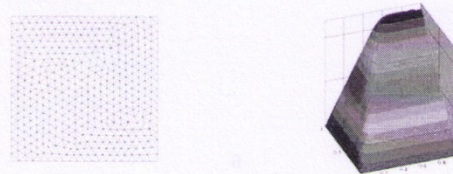


Fig. 3. Adaptive meshes and their computed solutions of the boundary layer flow. (a) Initial mesh and its solution, (b) first adaptive mesh and its solution, (c) second adaptive mesh and its solution, and (d) third adaptive mesh and its solution.

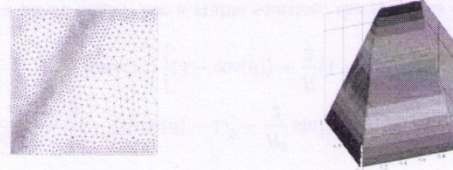
(b)  $V = 10^{-4}$ ,  $\kappa = 1.0$  for reaction-dominated problem

The computation starts from using the same initial unstructured mesh as shown in the previous example. The initial and adaptive meshes with their corresponding steady-state solutions for case (a) are shown in Fig. 4(a)–(d), respectively. The analysis is performed until the final time step is equal to 2. With such a small reaction effect, the solution profile flows across the domain with an increasing amount of its height until it approaches the outflow boundaries. The oscillation occurs along the fronts of the profile from the use of the coarse initial mesh and diminishes after the second mesh adaptation. For case (b) where the reaction is dominated, the solution profile also flows across the domain with an increasing amount of its uniform height throughout the domain. This latter case is performed until the final time step is equal to 1. Fig. 5(a)–(d) show the initial and adaptive meshes with their corresponding solutions at the final time by using three-dimensional contour plots. Spurious oscillations occur along the profile fronts because of the coarse mesh. Such oscillations disappear after the meshes are adapted with small elements along the fronts of the profiles.

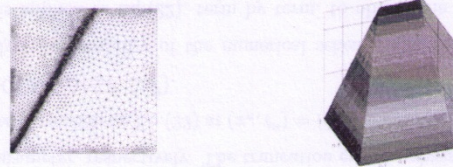




(a) Initial mesh and its solution



(b) First adaptive mesh and its solution



(c) Second adaptive mesh and its solution



(d) Third adaptive mesh and its solution

Fig. 4. Adaptive meshes and their computed solutions of the oblique inflow convection-reaction (convection-dominated) problem. (a) Initial mesh and its solution, (b) first adaptive mesh and its solution, (c) second adaptive mesh and its solution, and (d) third adaptive mesh and its solution.

#### 5.4. Corner layer problem

The fourth example is a singularly perturbed diffusion-reaction problem [18]. The computational domain is a unit square of  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ . The initial condition,  $\phi_0(\bar{x})$ , and the Dirichet boundary condition,  $\phi(\bar{x})$ , are prescribed as zero. The source term is given by,

$$q = 20(x^2 + y^2) + 4 \quad (35)$$

The diffusion coefficient is specified as  $\epsilon = 10^{-3}$ , and the reaction coefficient,  $\kappa$ , is set to be 2. This example is performed until the final time step is equal to 5. The solution profile exhibits very sharp boundary layer along the sides  $x = 1$  and  $y = 1$ . If the meshes in these regions are not fine enough, oscillated solution may occur along these boundaries, especially

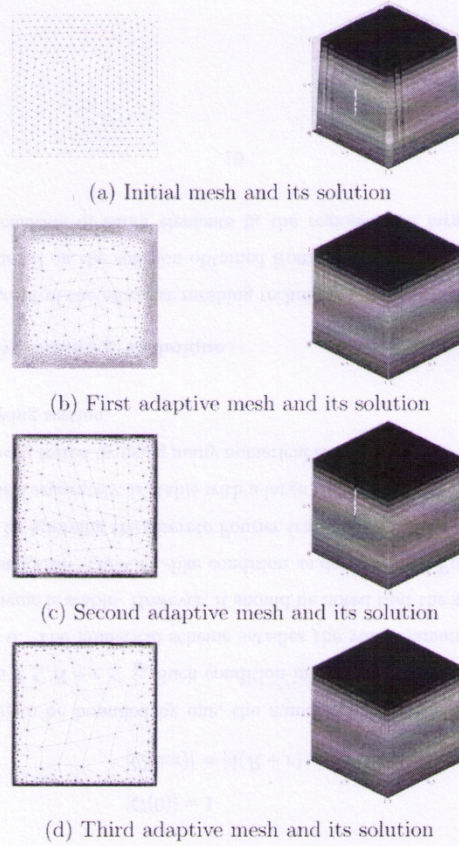


Fig. 5. Adaptive meshes and their computed solutions of the oblique inflow convection-reaction (reaction-dominated) problem. (a) Initial mesh and its solution, (b) first adaptive mesh and its solution, (c) second adaptive mesh and its solution, and (d) third adaptive mesh and its solution.

at the corner point (1, 1). In order to help suppressing such oscillation, the Barth and Jespersen limiter function [1] is imposed as follows:

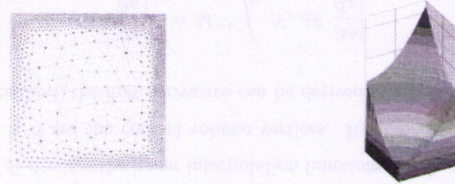
$$\alpha_{\Omega_i}^{BJ} = \min_{\forall \Gamma_{ij} \in \partial\Omega_i} \begin{cases} \frac{\phi_i^{\max} - \phi_i^n}{\phi_{ij}^{n+1/2} - \phi_i^n}, & \phi_{ij}^{n+1/2} > \phi_i^{\max} \\ \frac{\phi_i^{\min} - \phi_i^n}{\phi_{ij}^{n+1/2} - \phi_i^n}, & \phi_{ij}^{n+1/2} < \phi_i^{\min} \\ 1, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (36)$$

where  $\phi_i^{\max} \equiv \max_{\forall \Gamma_{ij} \in \partial\Omega_i} (\phi_i, \phi_j)$ , (37a)

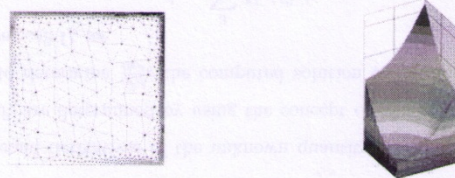




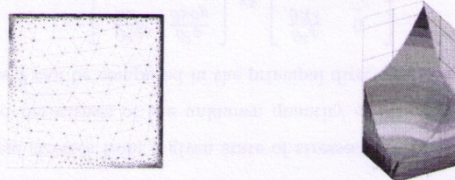
(a) Initial mesh and its solution



(b) First adaptive mesh and its solution



(c) Second adaptive mesh and its solution



(d) Third adaptive mesh and its solution

Fig. 6. Adaptive meshes and their computed solutions of the corner layer problem. (a) Initial mesh and its solution, (b) first adaptive mesh and its solution, (c) second adaptive mesh and its solution, and (d) Third adaptive mesh and its solution.

$$\text{and } \phi_i^{\min} \equiv \min_{\forall \Gamma_{ij} \in \partial\Omega_i} (\phi_i, \phi_j) \quad (37b)$$

The computation is initially performed by using an unstructured mesh with 884 uniform triangular cells (20 cells along each boundary). As the meshes are adapted with the computed solutions, small element sizes are generated in the region of high solution gradients along the boundary sides  $x=1$  and  $y=1$ . Fig. 6(a)–(d) show the initial and adaptive meshes with their corresponding solutions at the final time. The computed solution obtained from the initial mesh shows some oscillations without overshooting along the boundary. Oscillations decrease as the meshes are adapted with the solutions.



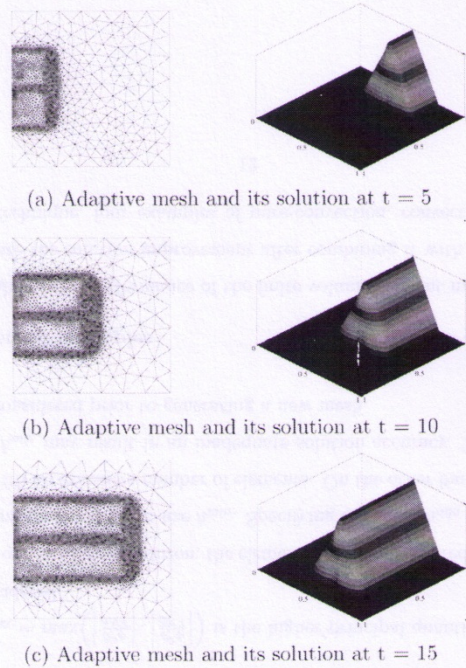


Fig. 7. Adaptive meshes and their computed solutions of triangular wave flow problem. (a) Adaptive mesh and its solution at  $t=5$ , (b) adaptive mesh and its solution at  $t=10$ , and (c) adaptive mesh and its solution at  $t=15$ .

### 5.5. Triangular wave flow problem

The last example is the pure-convection of triangular wave flow problem. The computational domain is a unit square of  $\Omega = (0, 1) \times (0, 1)$ . The initial condition,  $\phi_0(\vec{x})$  is set to be zero. The boundary conditions are prescribed by,

$$\phi(0, y) = \begin{cases} 2(y - 0.25), & 0.25 \leq y < 0.50 \\ 2(0.75 - y), & 0.50 \leq y \leq 0.75 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (38)$$

The velocity field is given by  $\vec{v} = 0.05\vec{i}$ . This example is used to evaluate the performance of the method when the adaptive meshes and their solutions vary with time. Fig. 7(a)–(c) show the adaptive meshes and their corresponding solutions at time  $t=5$ , 10, and 15, respectively. These figures show that refined meshes are generated along the edges and profile front to capture high solutions gradients.

### 6. Conclusion

This paper presents a combination of an adaptive meshing technique and the finite volume element method for solving the unsteady convection-diffusion-reaction equation by using unstructured triangular cells. Theoretical formulation of the proposed method and the concept of adaptive meshing technique were explained. The finite volume method was applied to discretize the convection-diffusion-reaction equation and the weighted residuals concept of the finite element



method was implemented to estimate the gradient quantities at cell faces. Second-order accuracy in both space and time are achieved by applying the Taylor's series expansion along the local characteristic lines. The adaptive meshing technique generates small clustered elements in the regions of high solution gradients to increase the solution accuracy. Larger elements are generated in the other regions to reduce the computational time and computer memory. Five test cases were used to evaluate performance of the combined adaptive meshing and the finite volume element method. Results show that the combined method provides improved solution accuracy with the adaptive meshes.

#### Acknowledgement

The authors would like to thank the Office of Higher Education Commission, the Thailand Research Fund, and the National Metal, Materials Technology Center and Chulalongkorn University for supporting this research work.

#### References

- [1] T. Barth, M. Ohlberger, *Encyclopedia of Computational Mechanics Volume 1: Fundamentals*, John Wiley and Sons, 2004.
- [2] E.G.D. Carmo, G.B. Alvarez, A new stabilized finite element formulation for scalar convection-diffusion problems: the streamline and approximate upwind/Petrov-Galerkin method, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 192 (2003) 3379–3396.
- [3] E.G.D. Carmo, G.B. Alvarez, F.A. Rochinha, A.F.D. Loula, Galerkin projected residual method applied to diffusion-reaction problems, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 197 (2008) 4559–4570.
- [4] R. Codina, Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 156 (1998) 185–210.
- [5] P. Dechaumphai, Adaptive finite element technique for heat transfer problems, *J. Energ. Heat Mass Transfer* 17 (1995) 87–94.
- [6] P. Dechaumphai, *Finite Element Method: Fundamentals and Applications*, Alpha Science Int. Ltd, 2010.
- [7] F. Ilincă, J.F. Hetu, A new stabilized finite element method for reaction-diffusion problems: the source-stabilized Petrov-Galerkin method, *Int. J. Num. Meth. Eng.* 75 (2008) 1607–1630.
- [8] H. Jasak, H.G. Weller, A.D. Gosman, High resolution NVD differencing scheme for arbitrarily unstructured meshes, *Int. J. Num. Meth. Fluids* 31 (1999) 431–449.
- [9] A. Kruganov, E. Tadmor, New high-resolution central schemes for nonlinear conservation laws and convection-diffusion equations, *J. Comput. Phys.* 160 (2000) 241–282.
- [10] S. Lamine, M.G. Edwards, High-resolution convection schemes for flow in porous media on highly distorted unstructured grids, *Int. J. Num. Meth. Eng.* 76 (2008) 1139–1158.
- [11] R.J. Leveque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, 3rd edition, Cambridge University Press, 2005.
- [12] W. Limtrakarn, P. Dechaumphai, High-speed compressible flow analysis by adaptive cell-centered finite elements, *J. Energ. Heat Mass Transfer* 24 (2002) 141–162.
- [13] A. Malatip, N. Wansophark, P. Dechaumphai, Combined streamline upwind Petrov Galerkin method and segregated finite element algorithm for conjugated heat transfer problems, *J. Mech. Sci. Technol.* 20 (2009) 1741–1752.
- [14] J. Peraire, J. Peiro, L. Formaggia, K. Morgan, O.C. Zienkiewicz, Finite element Euler computations in three dimensions, *Int. J. Num. Meth. Fluids* 26 (1995) 2135–2159.
- [15] J. Peraire, M. Vahjdati, K. Morgan, O.C. Zienkiewicz, Adaptive remeshing for compressible flow computation, *J. Comput. Phys.* 72 (1987) 449–466.
- [16] S. Phongthanapanich, P. Dechaumphai, A characteristic-based finite volume element method for convection-diffusion-reaction equation, *Trans. Can. Soc. Mech. Eng.* 32 (2008) 549–559.
- [17] S. Phongthanapanich, P. Dechaumphai, Combined finite volume and finite element method for convection-diffusion-reaction equation, *J. Mech. Sci. Technol.* 23 (2009) 790–801.
- [18] S. Phongthanapanich, P. Dechaumphai, Combined finite volume element method for singularly perturbed reaction-diffusion problems, *Appl. Math. Comput.* 209 (2009) 177–185.
- [19] J. Principe, R. Codina, On the stabilization parameter in the subgrid scale approximation of scalar convection-diffusion-reaction equations on distorted meshes, *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* 199 (2010) 1386–1402.
- [20] H. Wang, J. Liu, Development of CFL-free explicit schemes for multidimensional advection-reaction equations, *SIAM J. Sci. Comput.* 23 (2001) 1418–1438.
- [21] O.C. Zienkiewicz, R. Codina, A general algorithm for compressible and incompressible flow – part I. The split, characteristic-based scheme, *Int. J. Num. Meth. Fluids* 20 (1995) 869–885.
- [22] O.C. Zienkiewicz, R.L. Taylor, *The Finite Element Method Volume 3: Fluid Dynamics*, 5th edition, Butterworth-Heinemann, 2000.

### ประวัติผู้เขียนวิทยานิพนธ์

นางสาวพัชรี ชีระเอก เกิดเมื่อวันที่ 4 กันยายน พุทธศักราช 2518 ที่จังหวัด นครราชสีมา สำเร็จการศึกษาปริญญาวิศวกรรมศาสตรบัณฑิตจากภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ในปีการศึกษา 2541 และสำเร็จการศึกษา ปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิตจากภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2548 จากนั้นจึงเข้าศึกษาต่อในหลักสูตรปริญญา วิศวกรรมศาสตรดุษฎีบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ในปีการศึกษา 2550