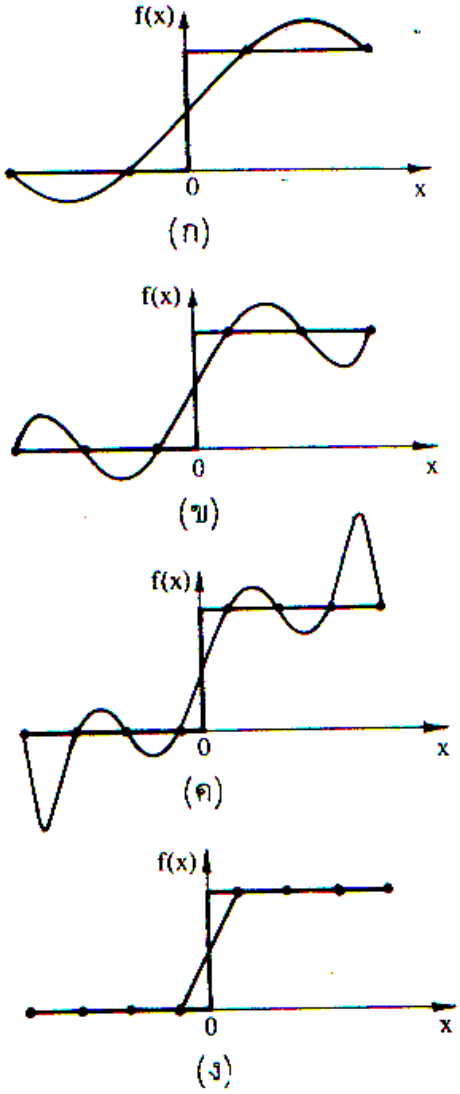
บทที่ 3
การวิเคราะห์ระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

3.1 กล่าวนำ

การออกแบบระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์สำหรับโหลดที่มีการใช้งานอย่างต่อเนื่อง พบปัญหาเมื่อมีการใช้งานระบบเป็นระยะยาว ไม่สามารถทำงานเป็นไปตามที่ได้ออกแบบไว้ ทางผู้วิจัยหาวิธีการหรือเครื่องมือที่จะมาแก้ไข หรือลดปัญหาข้างต้นให้น้อยลงในระดับที่ยอมรับได้(ทำให้การใช้งานในระยะยาว สำหรับโหลดที่ทำงานอย่างต่อเนื่องนั้นมี สมรรถนะและความน่าเชื่อถือได้สูงกว่า)จากการศึกษาหาเครื่องมือและรูปแบบวิธีการในการแก้ปัญหาพบว่า ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข(Numerical Method) นั้นสามารถใช้งานในการแก้ปัญหาดังกล่าวและยังตอบสนองต่อการใช้งานทางด้านวิศวกรรมได้เป็นอย่างดีอีกด้วย[15]

3.2 การหาค่าแทรกแบบสไพลน์ (Spline Interpolation)

เป็นที่ทราบกันว่า โพลิโนเมียลอันดับที่ n ใช้สำหรับหาค่าแทรกระหว่างข้อมูล $n+1$ จุด ตัวอย่างเช่น เมื่อข้อมูลมีทั้งหมดแปดจุดแล้ว ย่อมสามารถหาโพลิโนเมียลอันดับที่เจ็ด ซึ่งวกเวียนไปมาผ่านจุดทุกจุด[16] อย่างไรก็ตามอาจมีกรณีที่ฟังก์ชั่นเหล่านี้นำไปสู่ข้อผิดพลาดได้ การศึกษาอีกวิธีหนึ่งคือ การประยุกต์โพลิโนเมียลอันดับต่ำกว่าต่อเซตย่อย (Subset) ของจุดข้อมูล (data points) โพลิโนเมียลเชื่อมต่อแบบนี้ คือ สไพลน์ ฟังก์ชั่น (Spline functions) ตัวอย่างเช่น โค้งอันดับที่สามใช้เชื่อมต่อจุดข้อมูลแต่ละคู่นั้น เราเรียกว่า สไพลน์กำลังสาม (Cubic splines) ฟังก์ชั่นเหล่านี้มีคุณสมบัติพิเศษคือ ทำให้การเชื่อมต่อระหว่างสมการกำลังสาม (Cubic equations) เรียบ เมื่อดูผิวเผินแล้วจะเห็นว่าการประมาณของสไพลน์อันดับที่สามนั้นด้อยกว่าการใช้โพลิโนเมียลอันดับที่เจ็ด รูป 3.1 แสดงถึงสถานะที่สไพลน์กระทำได้ดีกว่าโพลิโนเมียลอันดับสูงกว่า นี่เป็นกรณีที่ฟังก์ชั่นเรียบแต่ว่าได้มีการเปลี่ยนแปลงอย่างฉับพลัน ณ บริเวณที่สนใจ $(x=0)$ โดยรูป 3.1 (ก) ถึงรูป 3.1(ค) แสดงถึงว่าโพลิโนเมียลอันดับสูงกว่า มีการแกว่งอย่างมากในอาณาบริเวณของการเปลี่ยนแปลงฉับพลันในทางตรงข้าม สไพลน์ก็เชื่อมจุดด้วยเหมือนกัน แต่ว่าได้ถูกจำกัดแค่การเปลี่ยนแปลงอันดับสามเท่านั้น ฉะนั้น การแกว่งจึงได้มีน้อยมากด้วยเหตุนี้ สไพลน์จึงใช้ประมาณพฤติกรรมของฟังก์ชั่นได้ดีกว่า



รูปที่ 3.1 สถานะที่สไพลน์ดีกว่า โพลิโนเมียลการหาค่าแทรกอันดับสูงกว่าฟังก์ชั่นได้รับการปรับที่การเพิ่มขึ้นฉับพลันที่ $(x = 0)$

เมื่อพิจารณารูป 3.1(ก) ถึงรูป 3.1 (ค) จะพบว่าการเปลี่ยนแปลงอย่างฉับพลัน ก่อให้เกิดการแกว่งของโพลิโนเมียลการหาค่าแทรก ตรงกันข้ามเนื่องจากการจำกัดเพียงโค้งอันดับที่สาม พร้อมกับมีการเคลื่อนไปอย่างสม่ำเสมอแล้ว สไพลน์กำลังสาม (cubic spline) (ง) ให้การประมาณที่ยอมรับได้ดีกว่า

3.2.1 สไพลน์เชิงเส้น (Linear Splines)

การเชื่อมต่อระหว่างจุดสองจุดที่ง่ายที่สุด คือ เส้นตรงสไพลน์อันดับที่หนึ่ง สำหรับกลุ่มของจุดข้อมูลที่ให้อันดับ [17] อาจนิยามเป็นเซตของฟังก์ชั่นเชิงเส้นเชื่อมต่อจุด ดังนี้

$$f(x) = f(x_0) + m_0(x - x_0) \quad x_0 \le x \le x_1$$
$$f(x) = f(x_1) + m_1(x - x_1) \quad x_1 \le x \le x_2$$
$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$
$$f(x) = f(x_{n-1}) + m_{n-1}(x - x_{n-1}) \quad x_{n-1} \le x \le x_n$$

เมื่อ m_i เป็นความชันของเส้นตรงเชื่อมต่อระหว่างจุด

$$m_i = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

สมการเหล่านี้ อาจใช้หาค่าของฟังก์ชั่นที่จุดใดๆระหว่าง x_0 และ x_n โดยระบุตำแหน่งที่จุดอยู่ภายในช่วง แล้วใช้สมการที่เหมาะสมหาค่าของฟังก์ชั่นภายในช่วง วิธีนี้จะเหมือนกับการหาค่าแทรกเชิงเส้น

ข้อเสียเปรียบของสไพลน์อันดับที่หนึ่งคือ โค้งที่ยังไม่เรียบพอ นอกจากนั้นที่จุดข้อมูลที่สองสไพลน์พบกัน (เรียกว่า knot) ความชันจะเปลี่ยนแปลงอย่างฉับพลัน ปกติอนุพันธ์ของฟังก์ชั่นจะไม่ต่อเนื่องที่จุดนี้ ข้อบกพร่องนี้สามารถเอาชนะโดยการใช้สไพลน์โพลิโนเมียลที่มีอันดับสูงกว่า ซึ่งจะประกันได้ว่า ความเรียบที่ปม (knot) เท่ากับอนุพันธ์ที่จุดเหล่านี้

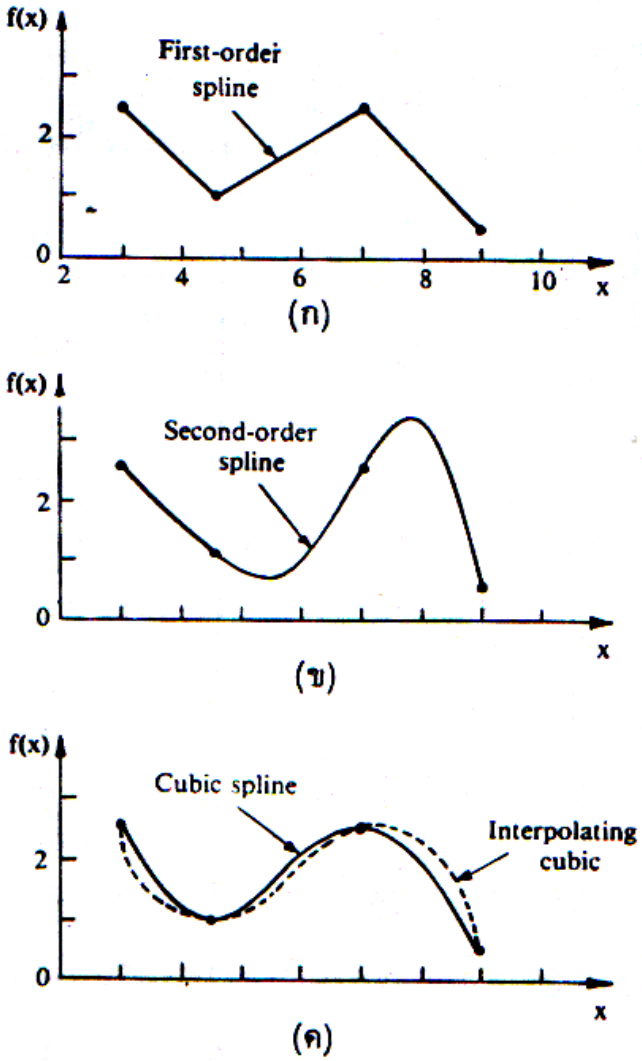
3.2.2 สไพลน์กำลังสอง (Quadratic Splines)

เพื่อยืนยันว่าอนุพันธ์อันดับที่ m มีความต่อเนื่องที่ปม (knot) จะต้องใช้สไพลน์อย่างน้อยอันดับที่ $m+1$ โพลิโนเมียลอันดับที่สาม หรือสไพลน์กำลังสาม (cubic splines) ที่ยืนยันความต่อเนื่องของอนุพันธ์ที่หนึ่งและที่สอง ได้ใช้กันมากทางปฏิบัติ แม้ว่าอนุพันธ์อันดับสามและสูงกว่าอาจไม่ต่อเนื่องเมื่อใช้สไพลน์กำลังสามก็ตาม แต่ก็ไม่อาจตรวจจับด้วยตาได้ และมักจะไม่คำนึงถึง

แม้ว่าได้พาดพิงถึงที่มาของสไพลน์กำลังสามอยู่ด้วยก็ตาม แต่จะขอนำไปกล่าวไว้ในลำดับถัดไป ในที่นี้จะได้พูดถึงแนวความคิดของการหาค่าแทรกแบบสไพลน์ (Spline interpolation) โดยใช้โพลิโนเมียลอันดับที่สอง สไพลน์กำลังสอง (quadratic splines) เหล่านี้ ต่างมีอนุพันธ์อันดับต่อเนื่องที่จุดปม (knot) แม้ว่าสไพลน์กำลังสองจะไม่รับประกันการเท่ากันของอนุพันธ์อันดับที่สองที่จุดปมก็ตาม แต่ก็ให้ขั้นปฏิบัติการที่ดีสำหรับการพัฒนาสไพลน์อันดับสูงกว่า

จุดประสงค์ของสไพลน์กำลังสอง คือ การหาโพลิโนเมียลอันดับที่สองสำหรับแต่ละช่วงระหว่างจุดข้อมูล โพลิโนเมียลสำหรับแต่ละช่วงสามารถแทนด้วยรูปทั่วๆไป ดังนี้

$$f_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i \qquad (3.1)$$



รูปที่ 3.2 สไพลน์การปรับชุดของข้อมูลสี่จุด

ก) สไพลน์เชิงเส้น

ข) สไพลน์กำลังสอง (Quadratic Splines)

ค) สไพลน์กำลังสามพร้อมกับโพลิโนเมียลการหาค่าแทรกกำลังสาม

รูปที่ 3.3 ได้แสดงกราฟของฟังก์ชั่นเหล่านี้ ไว้ในแต่ละช่วงถ้ามีข้อมูล $n+1$ จุด $(i=0,1,2,...,n)$ แล้วจะมี n ช่วง ฉะนั้น จะมีตัวคงที่ไม่ทราบค่า (unknown Constant : a,b และ c) ที่ต้องคำนวณอยู่ $3n$ ตัว ดังนั้นย่อมมี $3n$ สมการ หรือเงื่อนไขที่ต้องการสำหรับหาค่าตัวไม่ทราบ เงื่อนไขที่จำเป็นเหล่านี้ มีดังนี้

(1) ค่าของฟังก์ชั่นต้องเท่ากับที่จุดปมภายใน เงื่อนไขนี้สามารถแทนด้วย

$$a_{i-1}x_{i-1}^2 + b_{i-1}x_{i-1} + c_{i-1} = f(x_{i-1}) \qquad (3.2)$$

$$a_i x_{i-1}^2 + b_i x_{i-1} + c_i \quad = f(x_{i-1}) \tag{3.3}$$

สำหรับ $i = 2$ ถึง n

เนื่องจากใช้เพียงจุดปมเท่านั้น ฉะนั้นสมการ (3.2) และ (3.3) แต่ละสมการจะมีเงื่อนไขอยู่ $n-1$ เงื่อนไข เมื่อรวมกันจะได้เท่ากับ $2n - 2$ เงื่อนไข

(2) ฟังก์ชั่นที่หนึ่งและฟังก์ชั่นสุดท้ายต้องผ่านจุดปลายสุด (endpoints) ฉะนั้น ต้องมีเงื่อนไขเพิ่มเติมอีก 2 เงื่อนไข คือ

$$a_1 x_0^2 + b_1 x_0 + c_1 \quad = \quad f(x_0) \tag{3.4}$$

$$a_n x_n^2 + b_n x_n + c_n \quad = \quad f(x_n) \tag{3.5}$$

ฉะนั้น จะมีทั้งหมดเท่ากับ $2n - 2 + 2 = 2n$ เงื่อนไข

(3) อนุพันธ์ที่หนึ่งที่จุดปมภายใน (interior knots) ต้องเท่ากัน อนุพันธ์ที่หนึ่งของสมการ

$$f(x) \quad = \quad ax^2 + bk + c$$

คือ $$f'(x) \quad = \quad 2ax + b$$

ฉะนั้น เงื่อนไขทั่วๆไป คือ

$$2a_{i-1} + b_{i-1} \quad = \quad 2a_i x_i + b_i \tag{3.6}$$

เมื่อ $i = 2$ ถึง n

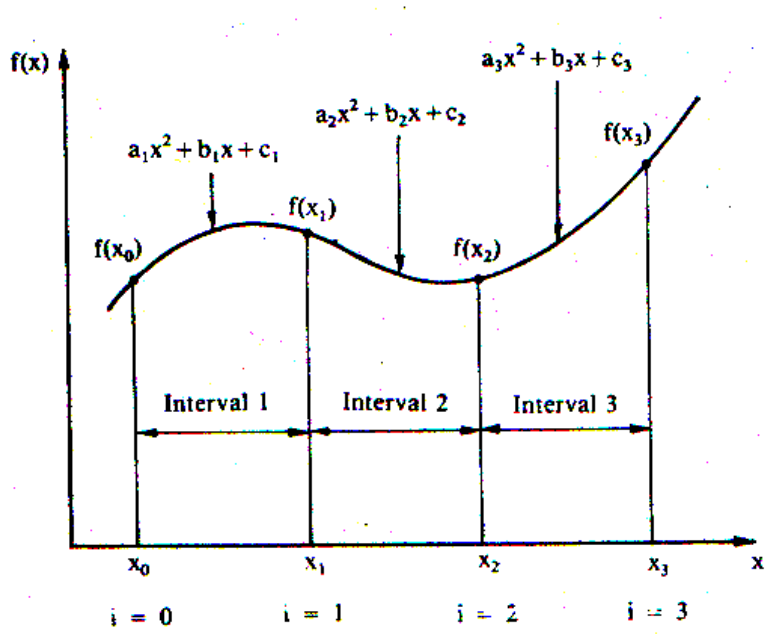
เงื่อนไขนี้ทำให้มีเงื่อนไขอื่นอีก $n-1$ เงื่อนไข ฉะนั้น เงื่อนไขทั้งหมดเท่ากับ $2n + n - 1 = 3n - 1$ เพราะว่า มีตัวไม่ทราบค่า $3n$ ค่า ฉะนั้น จึงลดไปได้หนึ่งเงื่อนไข

จากรูปจะเห็นว่ามี n ช่วงและจุดข้อมูล $n+1$ จุด ในรูปนี้ เป็นตัวอย่างในกรณีที่ $n = 3$ และจะต้องทำการเลือกโดยไม่เจาะจง เพื่อให้การคำนวณตัวคงที่บรรลุผล แม้ว่ามีจำนวนการเลือกที่แตกต่างกันสามารถทำได้

(4) สมมุติว่าอนุพันธ์ครั้งที่สองเท่ากับศูนย์ ณ จุดที่หนึ่ง เพราะว่าอนุพันธ์อันดับที่สองสมการ (3.1) เท่ากับ $2a_i$ เงื่อนไขนี้สามารถเขียนให้อยู่ในรูปคณิตศาสตร์ เป็น

$$a_1 \quad = \quad 0 \tag{3.7}$$

ความหมายของเงื่อนไขนี้คือ สองจุดแรกจะต่อกันด้วยเส้นตรง



รูปที่ 3.3 การหาสไพลน์กำลังสอง (quadratic splines) ในกรณีที่ $n=3$

การปรับโค้งโดยสไพลน์ทั้งหมด ได้แสดงไว้ในรูป 3.2 (ข) จะสังเกตเห็นว่า มีข้อบกพร่องอยู่สองอย่างที่ลดลงจากการปรับโค้งด้วยสไพลน์เชิงเส้น คือ

(1) เส้นตรงที่เชื่อมต่อระหว่างสองจุดแรก

(2) สไพลน์กำลังช่วงสุดท้าย ดูเหมือนจะสูงเกินไป แต่สไพลน์กำลังสามที่จะพูดถึงต่อไปนั้น จะไม่มีข้อบกพร่องเหล่านี้ ด้วยเหตุนี้จึงเป็นวิธีที่ดีกว่าสำหรับการหาค่าแทรกแบบสไพลน์

3.2.3 สไพลน์กำลังสาม (Cubic Splines)

จุดประสงค์ของสไพลน์กำลังสาม คือ การหาโพลิโนเมียลอันดับสามสำหรับแต่ละช่วงระหว่างปม (knot) [18] รูปต่อไปนี้

$$f_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i \tag{3.8}$$

ดังนั้น สำหรับจุดข้อมูล $n+1$ จุด $(i=0,1,2,\ldots,n)$ แล้ว ย่อมมี n ช่วง และมีตัวคงที่ไม่ทราบค่า $4n$ ตัวที่ต้องการหา และเงื่อนไข $4n$ งื่อนไข ที่ต้องการสำหรับหาตัวไม่ทราบค่า มีดังนี้

1. ค่าของฟังก์ชั่นต้องเท่ากันที่ปมภายใน (interior knots) จำนวน $(2n-2)$ เงื่อนไข
2. ฟังก์ชั่นที่หนึ่งและฟังก์ชั่นสุดท้าย ต้องผ่านจุดปลาย (มีสองเงื่อนไข)
3. อนุพันธ์ครั้งที่หนึ่งที่ปมภายใน (interior knots) ต้องเท่ากัน (มี $n-1$ เงื่อนไข)
4. อนุพันธ์ครั้งที่สองที่จุดปมภายในต้องเท่ากัน (มี $n-1$ เงื่อนไข)

5. อนุพันธ์อันดับที่สอง ที่จุดปมปลายจุด (end knots) มีค่าเป็นศูนย์ (มีอยู่ 2 เงื่อนไข)

การแปรความหมายของเงื่อนไขทั้งห้าที่เห็นได้ คือ ฟังก์ชั่นจะกลายเป็นเส้นตรงที่จุดปมปลายสุด (end knots) ข้อกำหนดของเงื่อนไข ณ จุดปลายเช่นนี้ นำไปสู่คำว่า สไพลน์ธรรมชาติ ที่ให้ชื่อแบบนี้ก็เพราะว่า สไพลน์วาดรูป (drafting spline) มีพฤติกรรมตามธรรมชาติแบบนี้ ถ้าค่าของอนุพันธ์อันดับที่สองที่จุดปมปลายสุดไม่เป็นศูนย์ (นั่นคือมีความโค้งบ้าง) ข้อมูลนี้อาจใช้เพื่อจัดให้มีเงื่อนไขจำเป็นสองเงื่อนไข

เงื่อนไขห้าแบบข้างบนเป็นผลให้มีสมการทั้งหมด $4n$ สมการ สำหรับหาตัวสัมประสิทธิ์ $4n$ ค่า ด้วยเหตุนี้ย่อมเป็นไปได้ในการพัฒนาสไพลน์กำลังสามรูปแบบนี้ ฉะนั้น จะได้เสนอเทคนิคอีกแบบหนึ่งที่ต้องการ คำตอบของสมการ $n-1$ สมการเท่านั้น แม้ว่าที่มาของวิธีนี้จะค่อนข้างตรงไปตรงมาน้อยกว่าสไพลน์กำลังสองก็ตาม แต่ได้ผลคุ้มค่า

ที่มาของสไพลน์กำลังสาม (Cubic Splines) ขั้นแรกในการหา (derivation) นั้น ขึ้นอยู่กับข้อสังเกตุที่ปมแต่ละคู่ได้ต่อกันด้วยเส้นโค้งกำลังสาม (cubic) ฉะนั้น อนุพันธ์อันดับที่สองภายในแต่ละช่วง จึงเป็นเส้นตรง อาจทำการหาอนุพันธ์สมการ(3.8) เพื่อพิสูจน์ข้อสังเกตนี้บนพื้นฐานอนุพันธ์อันดับสองสามารถแทนด้วยโพลิโนเมียลการหาค่าแทรกอันดับที่หนึ่ง (the first-order Lagrange interpolating polynomial)

$$f_i''(x) = f''(x_{i-1})\frac{x-x_i}{x_{i-1}-x_i} + f''(x_i)\frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} \tag{3.9}$$

เมื่อ $f_i''(x)$ เป็นค่าของอนุพันธ์อันดับสองที่จุด x ใดๆภายในช่วงที่ i ดังนั้น สมการนี้เป็นเส้นตรงที่เชื่อมต่ออนุพันธ์อันดับสองที่ปมที่หนึ่ง (first knot) $f''(x_{i-1})$ กับอนุพันธ์อันดับสองที่ปมที่สอง $f''(x_i)$ ต่อไป เมื่ออินทีเกรทสมการ (3.9) สองครั้ง จะได้นิพจน์ของ $f(x_i)$ อย่างไรก็ตาม นิพจน์นี้ยังคงมีตัวคงที่ไม่ทราบค่าจากการอินทีเกรทอยู่สองค่า ตัวคงที่เหล่านี้สามารถหาได้โดยการใช้เงื่อนไขการเท่ากันของฟังก์ชั่น กล่าวคือ $f(x)$ ต้องเท่ากับ $f(x_{i-1})$ ที่ x_{i-1} และ $f(x)$ ต้องเท่ากับ $f(x_i)$ ที่ x_i จากการหาค่าเหล่านี้ จะได้สมการกำลังสาม (cubic equation) ดังนี้

$$\begin{aligned} f_i(x) = {} & \frac{f''(x_{i-1})}{6(x_i x_{i-1})}(x_i-x)^3 + \frac{f''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1})}(x-x_{i-1})^3 \\ & + \left[\frac{f(x_{i-1})}{x_i-x_{i-1}} - \frac{f''(x_{i-1})(x_i-x_{i-1})}{6}\right](x_i-x) \\ & + \left[\frac{f(x_i)}{x_i-x_{i-1}} - \frac{f''(x_i)(x_i-x_{i-1})}{6}\right](x-x_{i-1}) \end{aligned} \tag{3.10}$$

จะเห็นว่าความสัมพันธ์นี้เป็นนิพจน์ที่สลับซับซ้อนมาก สำหรับสไพลน์กำลังสาม (cubic splines) สำหรับช่วงที่ i ยิ่งกว่าสมการ (3.8) อย่างไรก็ตาม จะพบว่าสมการนี้มีสัมประสิทธิ์ไม่ทราบค่าเพียงสองตัวเท่านั้น กล่าวคือ อนุพันธ์อันดับสองที่จุดเริ่มต้น และจุดปลายสุดของช่วง นั่นคือ $f''(x_{i-1})$ และ $f''(x_i)$

ดังนั้น ถ้าสามารถหาค่าอนุพันธ์ได้ถูกต้องที่แต่ละปม (knot) แล้วสมการ (3.10) คือ โพลิโนเมียลอันดับสามที่สามารถใช้หาค่าแทรกภายในช่วงได้

อนุพันธ์อันดับสองสามารถหาได้จากการใช้เงื่อนไขที่ว่า อนุพันธ์อันดับหนึ่งที่ปมต้องมีความต่อเนื่อง กล่าวคือ

$$f'_{i-1}(x) = f_i(x_i) \tag{3.11}$$

เราสามารถหาอนุพันธ์ของสมการ(3.10) เพื่ออนุพันธ์อันดับที่หนึ่ง ถ้าทำเช่นนี้ทั้งที่ช่วง $(i=1)$ และ (i) แล้วจัดผลลัพธ์ที่ได้ทั้งสองให้เท่ากัน ตามสมการ(3.11) จะได้ความสัมพันธ์ต่อไปนี้

$$\begin{aligned}(x_i - x_{i-1})f''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})f''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)f''(x_{i+1}) \\ = \frac{6}{(x_{i+1} - x_i)}\left[f(x_{i+1}) - f(x_i)\right] \\ = \frac{6}{(x_i - x_{i-1})}\left[f(x_{i-1}) - f(x_i)\right]\end{aligned} \tag{3.12}$$

ถ้าสมการ (3.11) ได้เขียนเพื่อปมอยู่ภายในทั้งหมดแล้ว ย่อมมีสมการหลายชั้น $(n-1)$ สมการพร้อมกับอนุพันธ์อันดับสองที่ไม่ทราบค่า $n+1$ ค่า อย่างไรก็ตาม โดยธรรมชาติของสไพลน์กำลังสาม, อนุพันธ์อันดับที่สองในปมปลายสุด (end knots) ต่างมีค่าเป็นศูนย์หมด ฉะนั้นปัญหาจึงลดลงเหลือเป็น $(n-1)$ สมการ ซึ่งมีตัวไม่ทราบค่า $(n-1)$ ค่า นอกจากนั้นขอให้สังเกตว่าระบบของสมการจะเป็นสามเส้นทแยงมุม (tridiagonal) ฉะนั้น ไม่เพียงแต่เป็นการลดจำนวนของสมการเท่านั้น แต่ยังเป็นการจัดรูปให้ง่ายต่อการแก้ปัญหาอีกด้วย

ผลลัพธ์ที่ได้ สรุปไว้ในรูป 3.2 จะสังเกตเห็นการปรับโค้งยิ่งดีขึ้น ขณะที่เรากระทำจากเชิงเส้นไปเป็นสมการกำลังสอง (Quadratic) และเปลี่ยนเป็นการใช้สไพลน์กำลังสาม (cubic splines) นอกจากนี้ ยังได้เพิ่มโพลิโนเมียลการหาค่าแทรกกำลังสาม (a cubic interpolating polynomial) ในรูป 3.2 (ค) แม้สไพลน์กำลังสามประกอบด้วยอนุกรมของโค้งอันดับสาม (a splines of third-order curves) ผลลัพธ์ที่ได้จากการปรับโค้งก็ต่างไปจากการใช้โพลิโนเมียลอันดับที่สาม ที่เป็นเช่นนี้ เนื่อง

จากความจริงที่ธรรมชาติของสไพลน์นั้น อนุพันธ์อันดับสองเป็นศูนย์ที่ปมปลายสุด ขณะที่โพลิโนเมียลกำลังสามไม่มีเงื่อนไขเช่นนั้น

3.3 การปรับโค้ง (Curve Fitting)

บ่อยครั้งที่นักวิทยาศาสตร์ และนักวิทยาศาสตร์ทางสังคม ต้องการปรับโค้งให้เหมาะสมกับข้อมูลจากการทดลอง เมื่อมีข้อมูลอยู่ $n+1$ จุด ย่อมสามารถใช้โพลิโนเมียลการหาค่าแทรกองศา n แต่ถ้า n ใหญ่มากแล้ว โพลิโนเมียลแบบนี้ก็ไม่เหมาะ[19] การที่จะให้ได้ผลดีกว่านี้ อาจทำได้โดยการใช้โพลิโนเมียลเป็นขั้น ๆ (piecewise polynomial) นั่นคือ ปรับโพลิโนเมียลองศาต่ำกว่าผ่านเซตย่อยของจุดข้อมูล (data points) รูปแบบการปรับโค้งที่ค่อนข้างแตกต่างกันออกไปและมีประสิทธิภาพสูงกว่า คือ least square ซึ่งเป็นการหาโพลิโนเมียลองศาต่ำที่เหมาะสมที่สุดผ่านจุดที่กำหนดให้

เราอาจเชื่อได้ว่า ความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรสามารถอธิบายได้ด้วยความสัมพันธ์เชิงฟังก์ชั่น $y=f(x)$ แต่ค่าของ y ที่หาได้จากการทดลองนั้น จะผูกพันกับความผิดพลาด (หรือ noise) ฉะนั้น ตัวแบบทางคณิตศาสตร์ของกรณีนี้ คือ

$$f(x_i)=y_i+\varepsilon_i \quad , \ (\ i=1,2,...,n \ \text{เมื่อมีจุดสังเกตุ} \ n \ \text{จุด}\ )$$

ในที่นี้ $f(x_i)$ เป็นค่าเชิงฟังก์ชั่นของ y ที่สมนัยกับค่าของ x_i ที่ใช้อยู่ในการทดลอง และ ε_i เป็นความผิดพลาดทางการทดลอง ซึ่งรวมอยู่ในการวัดของตัวแปร y ณ จุดนั้น ๆ ดังนั้น ความผิดพลาดใน y ที่จุดสังเกตเป็น $\varepsilon_i=f(x_i)-y_i$

ปัญหาของการปรับโค้ง คือการใช้ข่าวสารของข้อมูลที่สุ่มมาเพื่อหาโค้งที่เหมาะสม นั่นคือ หาฟังก์ชั่นเหมาะสม $f(x)$ ดังนั้น สมการ $y=f(x)$ สามารถใช้อธิบายความสัมพันธ์ (x,y) โดยหวังว่า การทำนายที่ได้จากสมการนี้ จะไม่เกิดความผิดพลาดมากเกินไป

3.3.1 การศึกษาปัญหาทั่วไป

การตอบคำถามว่าจะเลือกฟังก์ชั่นแบบใดนั้น ขอให้พิจารณาความเป็นไปได้ของวิธีต่อไปนี้

ให้ชุดของค่าที่สังเกตมาได้มีค่าเป็น $(x_1,y_1),(x_2,y_2),...,(x_n,y_n)$ เมื่อนำฟังก์ชั่นที่ทราบแล้ว ยกเว้นค่าของพารามิเตอร์ $k+1$ ตัว คือ $a_0,a_1,...,a_k$ และสามารถแทนฟังก์ชั่นนี้ด้วย $y=f(x;a_0,a_1,...,a_k)$

เราจะเลือกค่าของพารามิเตอร์ ซึ่งจะให้ค่าความผิดพลาดที่วัด ณ. จุด (x_i,y_i) มีค่าน้อยที่สุด และจะได้เสนอแนะวิธีการทำให้ค่าความผิดพลาดน้อยสุด ในหัวข้อถัดไป

ตัวอย่างของฟังก์ชั่นที่ใช้ได้แก่

(1) $y=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3+...+a_kx^k$ (โพลิโนเมียล)

(2) $y = a_0 \cos wx + a_1 \cos 2wx + ... + a_k \cos kwx$ (คอมบิเนชั่นของฟังก์ชั่นโคไซน์)

(3) $y = a_0 \sin wx + a_1 \sin 2wx + ... + a_k \sin kwx$ (คอมบิเนชั่นของฟังก์ชั่นไซน์)

(4) $y = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + ... + a_k\phi_k(x)$

เมื่อฟังก์ชั่น $\phi_1(x), \phi_2(x), ..., \phi_k(x)$ เป็นชุดของฟังก์ชั่นที่เลือกขึ้นมาก่อน

ใน (1) ชุดของฟังก์ชั่น คือ $\{1, x, x^2, ..., x^k\}$

ในสมการ (2) ชุดของฟังก์ชั่น คือ $\{\cos wx, \cos 2wx, ..., \cos kwx\}$

ส่วนในสมการ (3) ชุดของฟังก์ชั่น คือ $\{\sin wx, \sin 2wx, ..., \sin kwx\}$

สำหรับฟังก์ชั่นแบบอื่นที่นำมาใช้ในการปรับโค้ง ได้แก่ เอ็กซ์โพแนลเชียล ฟังก์ชั่นเบสเซลโพลิโนเมียล Legendre และโพลิโนเมียลเชพบิเซฟ

3.3.2 ความผิดพลาดต่ำสุด

หัวข้อนี้จะพูดถึงการเลือกฟังก์ชั่นที่ทำให้การวัดความผิดพลาดมีค่าน้อยที่สุด สมมติว่าโค้งที่ต้องการจะปรับ สามารถเขียนอยู่ในรูปเชิงเส้นทั่วไป โดยมีชุดของฟังก์ชั่นที่รู้ค่าแล้วเป็น $\{\phi_1(x), \phi_2(x), ..., \phi_k(x)\}$ ความผิดพลาด $\varepsilon_i = y - y_1$ ที่ข้อมูล n จุด ดังต่อไปนี้

$$\varepsilon_1 = c_1\phi_1(x_1) + c_2\phi_2(x_1) + ... + c_k\phi_k(x_1) - y_1$$
$$\varepsilon_2 = c_1\phi_1(x_2) + c_2\phi_2(x_2) + ... + c_k\phi_k(x_2) - y_2$$
$$\varepsilon_3 = c_1\phi_1(x_3) + c_2\phi_2(x_3) + ... + c_k\phi_k(x_3) - y_3$$
$$.....$$
$$\varepsilon_n = c_1\phi_1(x_n) + c_2\phi_2(x_n) + ... + c_k\phi_k(x_n) - y_n$$

ถ้าจำนวนจุดของข้อมูล (data-point) น้อยกว่าหรือเท่ากับจำนวนพารามิเตอร์ หรือ $n \le k$ แล้ว ย่อมทำให้หาค่าของ $\{c_1, c_2, c_3, ..., c_k\}$ ที่ทำให้ความผิดพลาด ε_i เป็นศูนย์ ถ้า $n < k$ แล้ว จะมี $\{c_i\}$ เป็นคำตอบจำนวนที่ไม่จำกัด ที่ทำให้ความผิดพลาดทั้งหมดเป็นศูนย์ ในกรณีนี้ไม่สามารถหาได้ครบถ้วน เนื่องจากต้องการข้อมูลมากขึ้นอีก จึงจะเลือกโค้งได้เหมาะสม

ถ้า $n > k$ เป็นกรณีที่พบบ่อยในทางปฏิบัติ ฉะนั้น ความผิดพลาดจะไม่สามารถทำให้เป็นศูนย์ทั้งหมด โดยการเลือก $\{c_i\}$ มีปฏิบัติการที่เป็นไปได้อยู่สามวิธี ดังต่อไปนี้

(1) เลือกเซต $\{c_i\}$ ซึ่ง minimize ความผิดพลาดสมบูรณ์ทั้งหมด นั่นคือ minimize ผลบวก $\sum_{i=1}^{n} |\varepsilon_i|$

(2) เลือกเซต $\{c_i\}$ ซึ่ง minimize ความผิดพลาดสมบูรณ์สูงสุด นั่นคือ minimize max $\{|\varepsilon_i|\}$

$$i = 1,2,...,n$$

(3) เลือกเซต $\{c_i\}$ ที่ minimize ผลบวกกำลังสองของความผิดพลาด (Sum of Square of Errors) นั่นคือ

$$\text{minimize } S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2$$

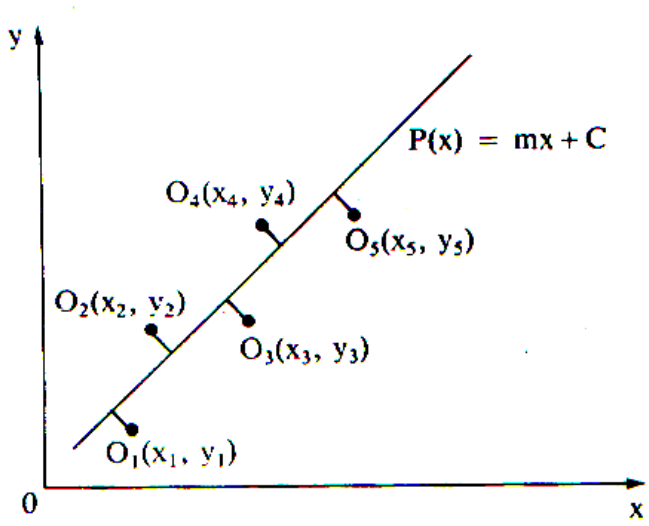
ปฏิบัติการ (1) และ (2) โดยทั่วไปแล้ว ยากต่อการนำมาใช้ ส่วนปฏิบัติในข้อ (3) นั้น นำไปสู่ระบบสมการเชิงเส้นที่สามารถหาเซต $\{c_i\}$ วิธีการเช่นนี้ เรียกว่าหลักของ least square และนิยมใช้กันมาก

3.3.3 วิธีของ Least Square

กำหนดให้ $y = f(x)$ ฉะนั้น ค่าที่เกิดขึ้น n ค่า ณ $x_1, x_2, x_3, ..., x_n$ คือ

$$y_1, y_2, y_3, ..., y_n$$

เราสามารถประมาณฟังก์ชั่นที่ไม่ทราบ $f(x)$ ด้วยโพลิโนเมียลองศา n ถ้า n มีค่าตั้งแต่สี่ขึ้นไปแล้ว การหาโพลิโนเมียลรูปสมบูรณ์ผ่านจุดทั้งหมด ทำได้ค่อนข้างยาก ฉะนั้น จำเป็นต้องประมาณฟังก์ชั่น $f(x)$ ด้วยโพลิโนเมียลองศาน้อยกว่า n เช่น ประมาณฟังก์ชั่น $f(x)$ ที่ผ่านจุดสังเกตมาได้ 5 จุด ด้วยโพลิโนเมียลองศา 1



รูปที่ 3.4 การประมาณฟังก์ชันจากจุดสังเกต 5 จุด ด้วยโพลิโนเมียลองศา 1

นี่แสดงว่า จะพยายามหาเส้นตรงที่ลากผ่านจุดทั้ง 5 จุดนี้ ซึ่งย่อมทำไม่ได้ง่ายนัก แต่อาจหาเส้นตรงที่ลากผ่านใกล้จุดเหล่านี้มากที่สุดเท่าที่จะเป็นไปได้ โดยยึดหลักว่า เส้นตรงใดก็ตามที่

ผ่านใกล้จุดทั้ง 5 จุดนี้แล้ว ย่อมทำให้ “ผลบวกกำลังสองของผลต่างที่แต่ละจุดระหว่างค่าที่กำหนดมาให้กับค่าที่เกิดจากการคำนวณ” หรือผลบวกกำลังสองของความผิดพลาดมีค่าน้อยที่สุด วิธีการเช่นนี้เรียกว่า วิธีของ Least Square

วิธีของ Least Square นี้ อาจนำไปใช้ในการหาโค้งผ่านจุดต่าง ๆ ได้ดีที่สุด เช่น ในการทดลองการวัดค่าต่าง ๆ อาจคลาดเคลื่อนจากความจริง

สรุปแล้วปัญหาของ Least Square คือ การหาค่าของค่าต่าง ๆ กล่าวคือ $a_0, a_1, a_2, ..., a_k$ ของโพลิโนเมียลองศา k

$$P_k(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + ... + a_k x^k$$

ซึ่งผ่านจุดต่าง ๆ n จุด คือ $(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n)$ เมื่อ $n > k$

การทำให้กำลังสองของผลต่างระหว่าง $f(x)$ และ $P_k(x)$ ณ จุดต่าง ๆ มีค่าน้อยที่สุดนั้น ต้องเลือกสัมประสิทธิ์ $a_0, a_1, ..., a_k$ ขึ้นมา เพื่อทำให้ผลบวกของความผิดพลาดกำลังสองมีค่าน้อยที่สุด

เนื่องจากความผิดพลาดหรือค่าเบี่ยงเบน เป็นผลต่างระหว่างค่าของ y ที่กำหนดขึ้น หรือค่าที่ได้จากการทดลองหรือค่าที่สังเกตมาได้ กับค่าที่เกิดจากการคำนวณของโพลิโนเมียลองศา k ที่ $x_0, x_1, x_2, ..., x_n$ นั่นคือ

$$\varepsilon_i = f(x_i) - P_k(x_i) \; ; \; i = 1,2,...,n$$

ฉะนั้น ความผิดพลาดกำลังสอง คือ

$$\varepsilon_i^2 = \{f(x_i) - P_k(x_i)\}^2$$

และผลบวกของความผิดพลาดกำลังสอง คือ

$$\sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - P_k(x_i) \right]^2$$

หรือ $$S = \sum_{i=1}^{n} \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i; a_0, a_1, ..., a_k) - y_i \right]^2$$

การหาค่าตัวคงที่ที่ทำให้ผลบวกของความผิดพลาดกำลังสอง มีค่าต่ำสุด ทำได้โดยหาอนุพันธ์ย่อยของ S เทียบพารามิเตอร์แต่ละตัว แล้วจัดให้เท่ากับศูนย์ ดังนี้

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0$$

.

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 0$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = 0$$

....

....

....

$$\frac{\partial S}{\partial a_k} = 0$$

การแก้สมการที่มีอยู่ $m+1$ สมการ เพื่อหา $a_0, a_1, ..., a_k$ ที่ทำให้ผลบวกของความผิดพลาดกำลังสองมีค่าต่ำสุด ชุดของสมการข้างบนนั้น มีชื่อว่า สมการปกติ (normal equation)

ต่อไปเป็นการศึกษาถึงการนำโพลิโนเมียลองศาต่างๆ มาประมาณฟังก์ชั่น $f(x)$

กรณีที่ 1 : เมื่อ $k=1$ แล้ว ต้องหาสมการ $y = a_0 + a_1 x$ ซึ่งเป็นโพลิโนเมียลองศาหนึ่ง ที่ทำให้ความผิดพลาดกำลังสอง

$$S = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - P_1(x_i) \right]^2 \quad \text{มีค่าต่ำสุด}$$

ถ้าใช้วิธีของ least square แล้ว ต้องหาค่าของ a_0, a_1 ที่ทำให้ความผิดพลาดกำลังสองมีค่าต่ำสุด ซึ่งทำดังนี้

จาก $S(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - P_1(x_i) \right]^2 = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - a_0 - a_1 x_i \right]^2$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(f(x_i) - a_0 - a_1 x_i \right) = 0$$

และ $$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i \left(f(x_i) - a_0 - a_1 x_i \right) = 0$$

หรือ $$\sum_{i=1}^{n} \left(f(x_i) - a_0 - a_1 x_i \right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \left(f(x_i) - a_0 - a_1 x_i \right) = 0$$

เมื่อหาค่าผลบวก และเทอมใหม่แล้ว สมการทั้งสองจะกลายเป็น

$$(n+1) a_0 + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

$$a_0 \sum_{i=0}^{n} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)(x_i)$$

เพื่อให้การคำนวณสะดวกยิ่งขึ้น จึงควรสร้างตารางช่วยคำนวณ หลังจากนั้นให้นำค่าที่ได้แทนลงไปในสมการปกติ เสร็จแล้วให้แก้สมการหาค่า a_0 และ a_1 เมื่อแทน a_0, a_1 ลงในโพลิโนเมียลองศาหนึ่ง จะได้สมการสำหรับปรับโค้งตามต้องการ

ตารางที่ 3.1 ตารางช่วยคำนวณสำหรับการปรับโค้งด้วยโพลิโนเมียลองศา 1

i	x_i	x_i^2	$f(x_i)$	$f(x_i)(x_i)$
1	x_1	x_1^2	$f(x_1)$	$f(x_1)(x_1)$
2	x_2	x_2^2	$f(x_2)$	$f(x_2)(x_2)$
3	x_3	x_3^2	$f(x_3)$	$f(x_3)(x_3)$
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
.	.	.	.	.
n	x_n	x_n^2	$f(x_n)$	$f(x_n)(x_n)$
	$\sum x_i$	$\sum x_i^2$	$\sum f(x_i)$	$\sum f(x_i)(x_i)$

กรณีที่ 2 : เมื่อ $k = 2$ แสดงว่า เราปรับโค้งด้วยโพลิโนเมียลองศา 2

$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ โดยลากผ่านข้อมูลจุดได้กระชับที่สุด การหาค่าของ a_0, a_1 และ a_2 สามารถทำได้โดยวิธีของ least square

จาก
$$S(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - P_2(x_i) \right]^2$$
$$= \sum_{i=1}^{n} \left[f(x_i) - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right]^2$$

เมื่อหาอนุพันธ์เทียบ a_0, a_1 และ a_2

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^{\infty} \left[f(x_i) - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right] = 0$$
$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=0}^{n} x_i \left[f(x_i) - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right] = 0$$
$$\frac{\partial S}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=0}^{n} x_i^2 \left[f(x_i) - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 \right] = 0$$

หรือ $$\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right]=0$$

$$\sum_{i=1}^{n}x_i\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right]=0$$

$$\sum_{i=1}^{n}x_i^2\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2\right]=0$$

เมื่อแก้สมการทั้งสามนี้แล้ว จะได้สมการปกติ ดังนี้

$$(n+1)a_0+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i+a\sum_{i=1}^{n}x_i^2=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}x_i+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i^2+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^3=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)x_i$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}x_i^2+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i^3+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^4=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)x_i^2$$

เพื่อความสะดวกในการแก้สมการหา a_0, a_1 และ a_2 ควรสร้างตารางช่วยการคำนวณดังต่อไปนี้

ตารางที่ 3.2 ตารางช่วยคำนวณสำหรับการปรับโค้งด้วยโพลิโนเมียลองศา 2

i	x_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$f(x_i)$	$f(x_i)(x_i)$	$f(x_i)x_i^2$
1	x_1	x_1^2	x_1^3	x_1^4	$f(x_1)$	$f(x_1)(x_1)$	$f(x_1)x_1^2$
2	x_2	x_2^2	x_2^3	x_2^4	$f(x_2)$	$f(x_2)(x_2)$	$f(x_2)x_2^2$
3	x_3	x_3^2	x_3^3	x_3^4	$f(x_3)$	$f(x_3)(x_3)$	$f(x_3)x_3^2$
4	x_4	x_4^2	x_4^3	x_4^4	$f(x_4)$	$f(x_4)(x_4)$	$f(x_4)x_4^2$
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.	.
n	x_n	x_n^2	x_n^3	x_n^4	$f(x_n)$	$f(x_n)(x_n)$	$f(x_n)x_n^2$
	$\sum x_i$	$\sum x_i^2$	$\sum x_i^3$	$\sum x_i^4$	$\sum f(x_i)$	$\sum f(x_i)(x_i)$	$\sum f(x_i)x_i^2$

กรณีที่ 3 : ถ้า $k=3$ แสดงว่าต้องการลากเส้นโค้ง หรือโพลิโนเมียลองศาสาม $P_3(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3$ ให้ผ่านจุด n จุด เมื่อใช้วิธีของ least square แล้ว ต้องหา a_0,a_1,a_2 และ a_3 ที่ทำให้

$$S(a_0,a_1,a_2,a_3)=\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i)-P_3(x_i)\right]^2$$

มีค่าต่ำสุด

การหาค่าของ a_0,a_1,a_2 และ a_3 ทำได้ดังนี้

จาก $$S(a_0,a_1,a_2,a_3)=\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3\right]^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_0}=-2\sum_{i=1}^{n}\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3\right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1}=-2\sum_{i=1}^{n}x_i\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3\right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_2}=-2\sum_{i=1}^{n}x_i^2\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3\right]$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_3}=-2\sum_{i=1}^{n}x_i^3\left[f(x_i)-a_0-a_1x_i-a_2x_i^2-a_3x_i^3\right]$$

เมื่อจัดให้ $\frac{\partial S}{\partial a_0}$, $\frac{\partial S}{\partial a_1}$, $\frac{\partial S}{\partial a_2}$ และ $\frac{\partial S}{\partial a_3}$ เท่ากับศูนย์ และจัดเทอมเสียใหม่ จะได้สมการปกติ สำหรับหาค่าพารามิเตอร์ที่ทำให้ความผิดพลาดกำลังสองค่าน้อยที่สุด ดังนี้

$$\sum_{i=1}^{n}a_0+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^2+a_3\sum_{i=1}^{n}x_i^3=\sum_{i=1}^{n}f(x_i)$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}x_i+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i^2+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^3+a_3\sum_{i=1}^{n}x_i^4=\sum_{i=1}^{n}x_if(x_i)$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}x_i^2+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i^3+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^4+a_3\sum_{i=1}^{n}x_i^5=\sum_{i=1}^{n}x_i^2f(x_i)$$

$$a_0\sum_{i=1}^{n}x_i^3+a_1\sum_{i=1}^{n}x_i^4+a_2\sum_{i=1}^{n}x_i^5+a_3\sum_{i=1}^{n}x_i^6=\sum_{i=1}^{n}x_i^3f(x_i)$$

ถ้ากำหนดให้ $y=f(x_i)$, $x=x_i$, $\sum_{i=1}^{n}=\sum$

แล้ว เมื่อเขียนสมการปกติข้างบนอยู่ในรูปของแมตริกซ์ จะมีรูปแบบดังต่อไปนี้

$$\begin{bmatrix} \sum a_0 & \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 & \sum x^5 \\ \sum x^3 & \sum x^4 & \sum x^5 & \sum x^6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y \\ \sum xy \\ \sum x^2 y \\ \sum x^3 y \end{bmatrix}$$

กรณีที่ 4 : ถ้า $k = n$ แล้ว แสดงว่าต้องการลากเส้นโค้ง

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + ... + a_n x^n$$

ผ่านชุดของข้อมูล n จุด ให้กระชับที่สุดนั้น การหาสมการปกติและแก้สมการเพื่อหาตัวพารามิเตอร์ ที่ทำให้ความผิดพลาดกำลังสองมีค่าต่ำสุด ก็ทำแบบเดียวกับกรณีที่ผ่านมา และเมื่อเขียนสมการปกติ ให้อยู่ในรูปของแมตริกซ์ จะได้ผลลัพธ์ตามรูปต่อไปนี้

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i ... \sum x_i^n \\ \sum x_i & \sum x_i^2 ... \sum x_i^{n+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 ... \sum x_i^{n+2} \\ ..... & ..... \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n+1} \quad \sum x_i^{2n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ .... \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum f(x_i) \\ \sum x_i f(x_i) \\ \sum x_i^2 f(x_i) \\ ..... \\ \sum x_i^n f(x_i) \end{bmatrix}$$

เมื่อ $\sum$ หมายถึง $\sum_{i=1}^{n}$

การใช้วิธีของ least square เท่าที่กล่าวมาแล้วนั้น ไม่จำเป็นต้องปรับโค้งด้วยโพลิโนเมียลก็ได้ อาจปรับข้อมูลที่สังเกตได้ หรือโจทย์ให้มาด้วยโค้งรูปอื่น โดยถือหลักว่าจำนวนพารามิเตอร์ของโค้งที่ต้องการนำมาปรับ ต้องน้อยกว่า n เสมอ เช่น อาจใช้ไฮเปอร์โบล่า $y = a_0 + \frac{a_1}{x}$ ลากผ่านจุด $n+1$ จุด ฉะนั้น จึงต้องหาค่าของ a_0 และ a_1 ที่ทำให้ผลบวกกำลังสองของความผิดพลาดมีค่าน้อยที่สุด นั่นคือ ต้องหา α_0 และ α_1 ที่ทำให้

$$S(\alpha_0,\alpha_1)=\sum_{r=1}^{n}\left[f_r-y_r\right]^2$$

$$=\sum_{r=1}^{n}\left|f-\alpha-\frac{\alpha_1}{x_r}\right|^2$$

มีค่าน้อยที่สุด

นอกจากนั้น บางครั้งมีความจำเป็นต้องปรับข้อมูล ด้วยโค้งที่มีลักษณะเป็นเอ็กซ์โพแนลเชียล หรือฟังก์ชั่นกำลัง (power function) เช่น

$$y=Ae^{\alpha x} \quad \text{และ} \quad y=ax^n$$

3.4 อินทีเกรชั่นเชิงตัวเลข

ปัญหาทั่วไปของการอินทีเกรทเชิงตัวเลข อาจกล่าวได้ดังต่อไปนี้ กำหนดเซตของจุดข้อมูล $(x_o,y_0),(x_1,y_1),...,(x_n,y_n)$ ของฟังก์ชั่น $y=f(x)$ ที่ไม่ทราบ $f(x)$ แน่ชัด[20] สำหรับการคำนวณค่าของอินทีกรัลจำกัดเขต

$$I=\int_a^b ydx \tag{3.13}$$

ก็ทำได้เช่นเดียวกับกรณีของการหาอนุพันธ์เชิงตัวเลข คือต้องแทน $f(x)$ ด้วยโพลิโนเมียล หาค่าแทรก $\phi(x)$แล้วทำการอินทีเกรทหาค่าประมาณของอินทีกรัลจำกัดเขต ดังนั้นสูตรการอินทีเกรทแบบต่าง ๆ อาจหาได้โดยขึ้นอยู่กับการใช้สูตรการหาค่าแทรกสูตรใดสูตรหนึ่งในหัวข้อนี้ ขั้นแรกจะหาสูตรทั่ว ๆ ไปของการอินทีเกรทเชิงตัวเลข โดยใช้สูตรของนิวตันแบบ forward

.ในช่วง $[a,b]$ ถูกแบ่งออกเป็น n ช่วงเท่าๆ กัน ซึ่ง

$$a=x_o<x_1<x_2...<x_n=b$$

ฉะนั้น อินทีกรัลจะกลายเป็น

$$I=\int_{x_o}^{x_n} ydx$$

เมื่อประมาณ y ด้วยสูตรของนิวตัน forward (Newton's difference formula) แล้วจะได้

$$I=\int_{x_o}^{x_n}\left[y_o+u\Delta y_o+\frac{u(u-1)}{2!}\Delta^2 y_0+\frac{u(u-1)(u-2)}{3!}\Delta^3 y_0+...\right]dx$$

เนื่องจาก $x=x_o+uh, dx=hdu$ ฉะนั้น อินทีกรัลข้างบนจะกลายเป็น

$$I = h\int_o^n \Big[\ y_o + u\Delta y_o + \frac{u(u-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{u(u-1)(u-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{u(u-1)(u-2)(u-3)}{4!}\Delta^4 y_o + \ldots\ \Big]dx$$

เมื่อทำให้ง่ายแล้วจะได้

$$\int_{x_o}^{x_n} ydx = h\Big[\ ny_o + \frac{n^2}{2}\Delta y_o + \left(\frac{n^3}{3} - \frac{n^2}{2}\right)\frac{\Delta^2 y_o}{2!} + \left(\frac{n^4}{4} - n^3 + n^2\right)\frac{\Delta^3 y_o}{3!} + \ldots\ \Big] \tag{3.14}$$

สมการ (3.14) นี้เรียกว่า general quadrature formula หรือ general formula จากสูตรทั่วไปนี้สามารถหาสูตรการอินทีเกรทรูปต่าง ๆ กันได้ โดยแทน

$n = 1,2,3,\ldots$

3.4.1 กฎ Trapezoidal

แทน $n = 1$ ลงในสมการ (3.14) และไม่คิดเทอมความแตกต่างที่มีอันดับสองและสูงกว่า

$$\int_{x_o}^{x_o+h} ydx = h\left[\ y_o + \frac{1}{2}\Delta y_o\ \right]$$

$$= h\left[\ y_o + \frac{y_1 - y_o}{2}\ \right]$$

$$= h\left(\frac{y_o + y_1}{2}\right)$$

ทำนองเดียวกัน

$$\int_{x_o+h}^{x_o+2h} ydx = h\left[\ y_1 + \frac{1}{2}\Delta y_1\ \right]$$

$$= h\left(\frac{y_1 + y_2}{2}\right)$$

$$\int_{x_o+n-1h}^{x_o+nh} ydx \;=\; h\left(\frac{y_{n\text{-}1}+y_n}{2}\right)$$

บวกอินทีกรัลเหล่านี้เข้าด้วยกันจะได้

$$\int_{x_o}^{x_n} ydx \;=\; \frac{h}{2}\left[\left(y_o+y_n\right)+2\left(y_1+y_2+y_3+\ldots+y_{n\text{-}1}\right)\right] \tag{3.15}$$

นี้คือกฎของ Trapezoidal

นัยสำคัญเชิงเรขาคณิตของกฎนี้ คือ โค้ง $y=f(x)$ จะถูกแทนด้วยเส้นตรง n เส้นเชื่อมระหว่าง (x_o,y_o) กับ (x_1,y_1) ; (x_1,y_1) กับ (x_2,y_2) ,...,(x_{n-1},y_{n-1}) กับ (x_n,y_n) แล้วพื้นที่ที่ถูกล้อมรอบด้วยโค้ง $y=f(x)$, เส้นตั้งที่ $x=x_o$ และ $x=x_n$ และแกน x จะมีค่าประมาณเท่ากับผลบวกของพื้นที่ของ n trapezium

ความผิดพลาดของสูตร trapezoidal สามารถหาได้ด้วยวิธีดังต่อไปนี้

ให้ $y=f(x)$ เป็นฟังก์ชั่นต่อเนื่อง และมีอนุพันธ์ต่อเนื่องในช่วง $\left[x_0,x_n\right]$ เมื่อกระจาย y ออกเป็นอนุกรมเทย์เลอร์รอบ $x=x_0$ จะได้

$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_1} ydx \;&=\; \int_{x_0}^{x_1}\left[y_0+(x-x_0)y_0{}'+\frac{(x-x_0)^2}{2}.y_0{}''+\ldots\right]dx\\ &=\; hy_0+\frac{h^2}{2!}y_0'+\frac{h_3{}^3}{3!}y_0{}''+\ldots\end{aligned} \tag{3.16}$$

แต่ $y_1=y_{0+h} \;=\; y_0+hy_0{}'+\frac{h^2}{2!}y_0{}''+\frac{h^3}{3!}y_0'''+\ldots$

$$\therefore \quad \frac{h}{2}\left[y_0+y_1\right] \;=\; \frac{h}{2}\left[y_0+hy_0{}'+\frac{h^2}{2}y_0{}''+\frac{h^3}{6}y_0'''+\ldots\right]$$

$$=hy_0+\frac{h^2}{2}y_0{}'+\frac{h^3}{4}y_0{}''+\frac{h^4}{12}y_0'''+\ldots \tag{3.17}$$

จากสมการ (3.16) และ (3.17) จะได้

$$\int_{x_0}^{x_1} ydx - \frac{h}{2}\left[y_0 + y_1\right] = -\frac{1}{12}h^3 y_0'' + \ldots \tag{3.18}$$

ซึ่งเป็นความผิดพลาดในช่วง $\left[x_0, x_1\right]$ โดยการกระทำในลักษณะเดียวกัน จะได้ความผิดพลาดในช่วงย่อยที่เหลือ กล่าวคือ $\left[x_1, x_2\right], \left[x_2, x_3\right], \ldots$ และ $\left[x_{n-1}, x_n\right]$ ดังนั้นจะได้

$$E = -\frac{1}{12}h^3\left[y_0'' + y_1'' + \ldots + y_{n-1}''\right] \tag{3.19}$$

เมื่อ E เป็นความผิดพลาดทั้งหมด สมมติว่า $y''(\bar{x})$ เป็นค่าใหญ่ที่สุดของ n ปริมาณทางด้านขวามือของสมการ (3.19) ดังนั้น จะได้

$$\begin{aligned} E &\approx \frac{1}{12}h^3 n y''(\bar{x}) \\ &= -\frac{(b-a)}{12}h^2 y''(\bar{x}) \end{aligned} \tag{3.20}$$

เมื่อ $nh = (b - a)$

3.4.2 กฎของ Simpson

กฎนี้หาได้โดยการแทน $n = 2$ ลงในสมการ (3.14) นั้นคือโดยแทนที่โค้งด้วย $\frac{n}{2}arc$ ของโพลิโนเมียลองศาสองหรือพาราโบล่า

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_0+2h} ydx &= h\left[2y_0 + 2(y_1 - y_0) + \frac{(8/3-2)}{2}(y_2 - 2y_1 + y_0)\right] \\ &= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \end{aligned}$$

ทำนองเดียวกัน

$$\int_{x_0+2h}^{x_0+4h} ydx = \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4)$$

$$\int_{x_0+(n-2)h}^{x_0+nh} ydx = \frac{h}{3}(y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n)$$

เมื่อ n เป็นเลขคู่

เมื่อบวกอินทีกรัลเหล่านี้เข้าด้วยกัน จะได้

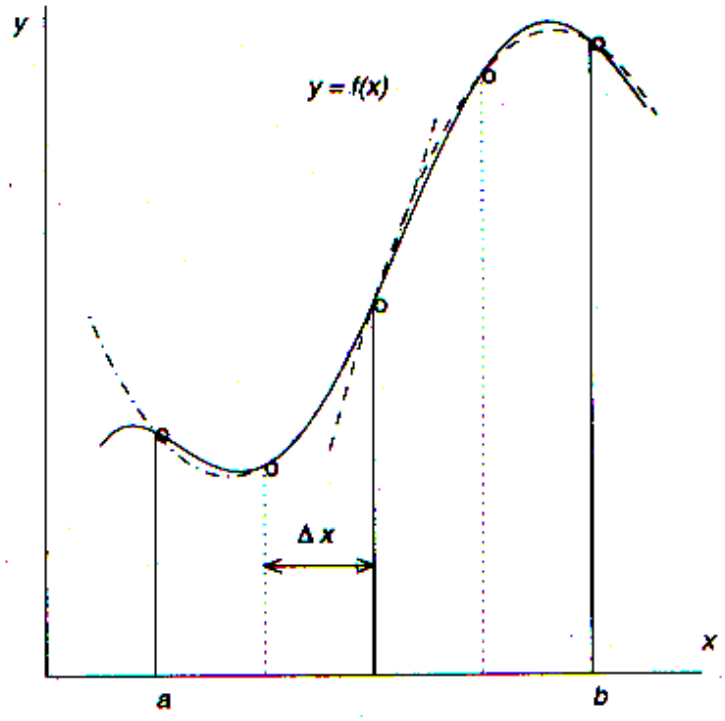
$$\int_{x_0}^{x_0+nh} ydx = \frac{h}{3}\left[(y_0 + y_n) + 4(y_1 + y_3 + \ldots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \ldots + y_{n-2})\right]$$

นี้คือสูตรของ Simpson's one third หรือบางทีเรียกง่าย ๆ ว่า กฎ simpson จะสังเกตเห็นว่ากฎนี้ต้องการการแบ่งพิสัยทั้งหมดออกเป็นช่วงย่อย ๆ ที่มีความกว้าง h จำนวนคู่

สำหรับความผิดพลาดที่เกิดขึ้นทั้งหมด คือ

$$E = -\frac{(b-a)}{180}h^4 y^{(iv)}(\bar{x})$$

เมื่อ $y^{(iv)}(\bar{x})$ เป็นค่าใหญ่ที่สุด ของอนุพันธ์อันดับที่สี่



รูปที่ 3.5 การอินทีเกรทเชิงตัวเลขด้วยวิธีการของ Simpson

3.4.3 กฎของ Simpson สามส่วนแปด (three-eight)

สูตรนี้หาได้จากการแทน $n = 3$ ลงในสมการ (3.14) และไม่คิดเทอมที่มีความแตกต่างตั้งแต่อันดับสูงกว่าสามขึ้นไป ดังนั้น

$$\int_{x_0}^{x_0+3h} ydx = h\left[3y_0 + \frac{9}{2}(y_1 + y_0) + \frac{9}{4}(y_2 + 2y_1 + y_0) + \frac{3}{8}(y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0)\right]$$

$$= \frac{3h}{8}\left[y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3\right]$$

ทำนองเดียวกัน

$$\int_{x_0+3h}^{x_0+6h} ydx = \frac{3h}{8}(y_3 + 3y_4 + 3y_5 + y_6)$$

เมื่อบวกพื้นที่ย่อยทั้งหมดภายในช่วง x_0 กับ x_n เมื่อ n เป็น multiple ของสามจะได้

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} ydx = \frac{3h}{8}\Big[(y_0 + y_n) + 3(y_1 + y_2 + y_4 + y_5 + \ldots + y_{n-1}) + 2(y_3 + y_6 + \ldots + y_{n-3})\Big]$$

นี้คือสูตรของ Simpson สามส่วนแปด

เมื่อพิจารณาสูตรนี้เป็นสองเท่าตัวแล้ว จะได้

$$\int_0^6 u_x dx = \frac{3}{8}h\left[(u_0 + u_6) + 3(u_1 + u_2 + u_4 + u_5) + 2u_3\right]$$

ในที่นี้ ไม่ได้คิดเทอมที่มีความแตกต่าง อันสูงกว่าสามขึ้นไป ซึ่งเท่ากับเราได้สมมติว่า y เป็นโพลิโนเมียลองศาสาม นั้นคือ y มีรูปเป็น $y = ax^3 + bx^2 + cx + d$

3.4.4 กฎของ Weddle

แทน $n = 6$ ลงในสมการ(3.14) และไม่คิดเทอมความแตกต่างตั้งแต่อันดับสูงกว่าหกแล้วเราจะได้

$$\int_{x_0}^{x_0+6h} ydx = h\Big[\, 6y_0 + 18\Delta y_0 + 27\Delta^2 y_0 + 24\Delta^3 y_0 + \frac{123}{10}\Delta^4 y_0 + \frac{33}{10}\Delta^5 y_0 + \frac{41}{140}\Delta^6 y_0 \,\Big]$$

ถ้าแทนเทอมสุดท้ายด้วย $\frac{3}{10}\Delta^6 y_0$ แล้ว ย่อมผิดพลาดไป $\frac{h}{140}\Delta^6 y_0$ ซึ่งสามารถตัดทิ้งได้ ถ้าค่าของ h น้อย โดยการสมมติเช่นนี้ เราจะแทนเทอมสุดท้ายด้วย $\frac{3}{10}\Delta^6 y_0$

ฉะนั้น

$$\int_{x_0}^{x_0+6h} ydx = \frac{3h}{10}\Big[y_0 + 5y_1 + y_2 + 6y_3 + y_4 + 5y_5 + y_6\Big]$$

ทำนองเดียวกัน

$$\int_{x_0+6h}^{x_0+12h} ydx = \frac{3h}{10}\Big[y_6 + 5y_7 + y_8 + 6y_9 + y_{10} + 5y_{11} + y_{12}\Big]$$

$$\int_{x_0+(n-6)h}^{x_0+nh} ydx = \frac{3h}{10}\Big[y_{n-6} + 5y_{n-5} + y_{n-4} + 6y_{n-3} + y_{n-2} + 5y_{n-1} + y_n\Big]$$

ถ้า n เป็น multiple ของ 6

เมื่อบวกพื้นที่ย่อยเข้าด้วยกัน จะได้

$$\int_{x_0}^{x_0+nh} ydx = \frac{3h}{10}\Big[y_0 + 5y_1 + y_2 + 6y_3 + y_4 + 5y_5 + 2y_6 + 5y_7 + y_8 + ...\Big]$$

นี้คือสูตรของ Weddle ที่มีความแม่นยำสูงกว่ากฎของ Simpson แต่ว่าต้องใช้ค่าของฟังก์ชั่นอย่างน้อยเจ็ดค่า และในที่นี้เราได้สมมติว่า

$$y = ax^6 + bx^5 + cx^4 + dx^3 + ex^2 + fx + g$$

ฉะนั้น ถ้า $f(x)$ เป็นโพลิโนเมียลองศาห้าหรือต่ำกว่าแล้วกฎของ Weddle ก็จะให้ผลลัพธ์ถูกต้อง

3.4.5 ความผิดพลาดในสูตรการหาอินทิเกรทแบบ Trapezoidal และ Simpson

3.4.5.1 ความผิดพลาดในสูตรของ Trapezoidal

การหาพื้นที่จากการใช้สูตร Trapezoidal เป็นเพียงการหาพื้นที่โดยถือว่า ฟังก์ชั่นที่ต้องการพื้นที่เป็นเส้นตรง แต่ถ้าฟังก์ชั่นที่ต้องการหาพื้นที่ไม่ใช่เส้นตรง ย่อมเกิดความผิดพลาด ส่วนความผิดพลาดจะมากน้อยเพียงใดนั้น จะได้วิเคราะห์ต่อไป

ถ้าต้องการหาพื้นที่ด้วยสูตรของ Trapezoidal จากฟังก์ชั่น $y=f(x)$ ในช่วง x_{i-1} กับ x_i โดยแบ่งเป็นช่วงย่อย ๆ ซึ่งกว้าง $h=\frac{b-a}{n}$ เมื่อ n เป็นจำนวนช่องที่ต้องการแบ่ง (a,b) ซึ่งเป็นลิมิตส่วนบนและล่างตามลำดับ

เนื่องจากค่าที่ถูกต้องของพื้นที่ใต้โค้ง $y=f(x)$ ในช่วง x_{i-1} ถึง x_i หาได้จาก

$$I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = F(x_i)-F(x_{i-1}) \tag{3.21}$$

ส่วนค่าพื้นที่คำนวณได้จากการใช้สูตร Trapezoidal คือ

$$A=\frac{h}{2}\left[f(x_{i-1})+f(x_i)\right]$$

ฉะนั้น ความผิดพลาดในการหาพื้นที่เมื่อใช้สูตร Trapezoidal รูปที่ i คือ

$$E_i = A_i - I_i \tag{3.22}$$

ถ้าใช้อนุกรม Taylor กระจาย $f(x_{i-1})$ รอบจุด $x=x_i$ จะได้

$$f(x_{i-1}) = f(x_i)+f'(x_i)(x_{i-1}-x_i)+\frac{F'''(x_i)}{2!}(x_{i-1}-x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i-1}-x_i)^3 \tag{3.23}$$

ฉะนั้น

$$\begin{aligned} f(x_{i-1}) &= f(x_i)+f'(x_i)(-h)+\frac{f''(x_i)}{2!}(-h)^2+\ldots \\ &= f(x_i)-hf'(x_i)+\frac{h^2f''(x_i)}{2!}-\frac{h^3f'''(x_i)}{3!}+\ldots \end{aligned} \tag{3.24}$$

เมื่อ $h=x_i-x_{i-1}$ หรือ $-h=x_{i-1}-x_i$

แทน $f(x_{i-1})$ ลงยัง

$$A_i = \frac{h}{2}\left[f(x_{i-1}) + f(x_i)\right]$$

จะได้

$$A_i = \frac{h}{2}\left[f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)h^2}{2!} - \frac{f'''(x_i)h^3}{3!} + f(x_i) \right]$$

$$= \frac{h}{2}\left[2f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)h^2}{2!} - \frac{f'''(x_i)h^3}{3!} + \ldots \right] \qquad (3.25)$$

และเมื่อกระจาย $F(x_{i-1})$ รอบจุด $x = x_i$ จะได้

$$F(x_{i-1}) = F(x_i) + F'(x_i)(x_{i-1} - x_i) + \frac{F''(x_i)}{2!}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{F'''(x_i)}{3!}(x_{i-1} - x_i)^3 + \ldots$$

$$= F(x_i) + F'(x_i)h + \frac{F''(x_i)h^2}{2!} - \frac{F'''(x_i)h^3}{3!} + \ldots \qquad (3.26)$$

แทน (3.26) ลงยัง (3.21) จะได้

$$I_i = F(x_i) + F(x_{i-1})$$

$$= F(x_i) - \left[F(x_i) - F'(x_i)h + \frac{F''(x_i)h^2}{2!} - \frac{f'''(x_i)h^3}{3!} \right]$$

$$= F'(x_i)h - \frac{F''(x_i)h^2}{2!} + \frac{F'''(x_i)h^3}{3!} \qquad (3.27)$$

เนื่องจาก $F(x)$ ได้มาจากการอินทีเกรทฟังก์ชั่น $f(x)$ ฉะนั้น

$$f(x) = F'(x)$$
$$f'(x) = F''(x)$$
$$f''(x) = F'''(x)$$
$$\vdots$$

ดังนั้น สมการ (3.27) จะกลายเป็น

$$I_i = f(x_i)h - \frac{f'(x_i)h^2}{2!} + \frac{f''(x_i)h^3}{3!} + \ldots \quad (3.28)$$

แทน (3.25) และ (3.28) ลงยังสมการ (3.22) จะได้

$$\begin{aligned} E_i &= A_i - I_i \\ &= \left[f(x_i)h - \frac{f'(x_i)h^2}{2!} + \frac{f''(x_i)h^3}{2 \cdot 2!} + \ldots \right] \\ &\quad - \left[f(x_i)h - \frac{f'(x_i)h^2}{2!} + \frac{f''(x_i)h^3}{3!} + \ldots \right] \\ &= \frac{f''(x_i)h^3}{4} - \frac{f''(x_i)h^3}{6} + \text{เทอมที่มี } h \text{ กำลังสูงกว่าขึ้นไป} \\ &= \left[\frac{1}{4} - \frac{1}{6} \right] f''(x_i)h^3 + \text{ เทอมที่มีกำลังสูงกว่า} \\ &= \frac{1}{12} f''(x_i)h^3 + \text{เทอมที่มีกำลังสูงกว่า} \end{aligned}$$

ถ้า h มีค่าน้อยแล้ว ย่อมสามารถตัดเทอมที่มีกำลังสูงกว่า h^4 ทิ้งได้ ดังนั้น

$$\begin{aligned} E_i &= \frac{h^3}{12} f''(x_i) \\ &= \frac{1}{12} \left(\frac{b-a}{n} \right) h^2 f''(x_i) \end{aligned}$$

เนื่องจากความผิดพลาดที่เกิดจากการหาพื้นที่ ตามวิธีของ Trapezoidal ณ รูปที่ i สามารถประมาณได้ โดยสมมติให้

$$\left| f''(x) \right| \leq M \quad \text{สำหรับ } x \text{ ทุก ๆ ค่าในพิสัย } a \leq x \leq b$$

แล้ว $$\left| E_i \right| \leq \frac{h^3}{12} M$$

เมื่อรวมความผิดพลาดของพื้นที่ทั้งหมด n รูป เข้าด้วยกันจะได้ความผิดพลาดทั้งหมดเป็น

$$\begin{aligned} E_i &\leq \frac{nh^3}{12} M \\ &= nh \frac{h^2}{12} M \\ &= (b-a) \frac{h^2}{12} M \end{aligned}$$

ดังนั้น ความผิดพลาดที่เกิดจากการใช้สูตร Trapezoidal ย่อมเป็นปฏิภาคโดยตรงกับ h^2

3.4.5.2 ความผิดพลาดจากการใช้สูตร Simpson

ก่อนที่จะศึกษาความผิดพลาดที่เกิดจากการใช้สูตรของ Simpson เศษหนึ่งส่วนสามขอให้ดูตัวอย่างการอินทีเกรท

$$A = \int_{-h}^{h} x^3 dx = \left[\frac{x^4}{4}\right]_{-h}^{h} = 0$$

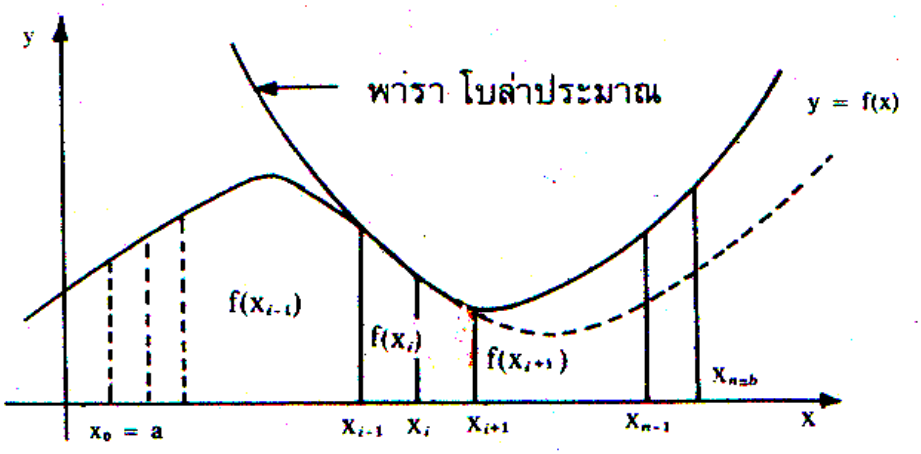
และถ้าใช้สูตร Simpson จะได้

$$A = \frac{h}{3}\left[f_0 + 4f_1 + f_2\right]$$

$$= \frac{h}{3}\left[-(-h)^3 + 4(0)^3 + (h)^3\right]$$

$$= 0$$

นี่แสดงว่าการหาพื้นที่ตามวิธีของ Simpson ย่อมมีความถูกต้องเมื่อสมการที่ต้องการหาพื้นที่เป็นสมการกำลังสาม (cubic) เท่านั้น การหาความผิดพลาดจากการใช้สูตรของ Simpson ขอให้ดูรูปที่ 3.6 ซึ่งแบ่งช่วง (a,b) ออกเป็นช่วงย่อย ๆ เท่ากัน n ช่วง



รูปที่ 3.6 การหาความผิดพลาดตามวิธีการของ Simpson

ถ้าหาพื้นที่ด้วยสูตรของ Simpson ที่แบ่งเป็นสองช่วง คือ จาก x_{i-1} ถึง x_i และจาก x_i ถึง x_{i+1} ความผิดพลาดที่เกิดจากการหาพื้นที่ในช่วงทั้งสอง คือ

$$E_i = A_i - I_i$$

เมื่อ A_i เป็นพื้นที่ซึ่งหาจากสูตรของ Simpson หรือ

$$A_i = \frac{h}{3}\left[f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})\right] \tag{3.29}$$

ส่วน I_i เป็นพื้นที่จริงซึ่งหาได้จากการอินทีเกรทฟังก์ชั่น $y = f(x)$ จาก x_{i-1} ถึง x_{i+1} หรือ

$$I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = F(x_{i+1}) - F(x_{i-1}) \tag{3.30}$$

ถ้าใช้อนุกรม Taylor กระจาย $f(x_{i-1})$ รอบจุด $x = x_i$ จะได้

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

หรือ

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{f''(x_i)h^2}{2!} + \frac{f'''(x_i)h^3}{3!} \tag{3.31}$$

และถ้ากระจาย $f(x_{i+1})$ ด้วยอนุกรม Taylor รอบจุด $x = x_i$ จะได้

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(x_{i+1} - x_i)^3 + \frac{f^{(4)}(x_i)}{4!}(x_{i+1} - x_i)^4 + \ldots$$

หรือ

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)h^2}{2!} + \frac{f'''(x_i)h^3}{3!} + \ldots \tag{3.32}$$

แทน (3.31) และ (3.32) ยังสมการ (3.29)

$$A_i = \frac{h}{3}\left[f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})\right]$$

จะได้

$$A_i = \frac{h}{3}\left[6f(x_i) + 2\frac{f''(x_i)h^2}{2!} + \frac{2f^{(4)}(x_i)h^4}{4!} + \ldots \right]$$
$$= 2f(x_i)h + \frac{2f''(x_i)h^3}{3!} + \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{3\cdot 4!} + \ldots \quad (3.33)$$

ต่อไปทำสมการ (3.30) ให้อยู่ในรูปกระทัดรัดยิ่งขึ้น ด้วยการใช้อนุกรม Taylor กระจาย $F(x_{i-1})$ รอบจุด $x = x_i$ ซึ่งจะได้

$$F(x_{i-1}) = F(x_i) + F'(x_i)(x_{i-1}-x_i) + \frac{F''(x_i)}{2!}(x_{i-1}-x_i)^2 + \frac{F'''(x_i)}{3!}(x_{i-1}-x_i)^3 + \frac{F^{(4)}(x_i)}{4!}(x_{i-1}-x_i)^4 + \ldots$$
$$= F(x_i) - F'(x_i)h + \frac{F''(x_i)h^2}{2!} + \frac{F'''(x_i)h^3}{3!} + \frac{F^{(4)}(x_i)h^4}{4!} + \ldots \quad (3.34)$$

ทำนองเดียวกัน ถ้ากระจาย $F(x_{i+1})$ รอบ $x = x_i$ จะได้

$$F(x_{i+1}) = F(x_i) + F'(x_i)h + \frac{F''(x_i)h^2}{2!} + \frac{F'''(x_i)h^3}{3!} + \frac{F^{(4)}(x_i)h^4}{4!} + \frac{F^{(5)}(x_i)h^5}{5!} + \ldots \quad (3.35)$$

ดังนั้น $I_i = F(x_{i+1}) - F(x_{i-1})$ จะกลายเป็น

$$I_i = 2F'(x_i)h + \frac{2F'''(x_i)h^3}{3!} + \frac{2F^{(5)}(x_i)h^5}{5!} + \ldots \quad (3.36)$$

เนื่องจาก

$$F'(x) = f(x)$$
$$F''(x) = f'(x)$$
$$F'''(x) = f''(x)$$

$$F^{(4)}(x) = f'''(x)$$

.

.

.

ฉะนั้น สมการ (3.36) จะกลายเป็น

$$I_i = 2f(x_i)h + \frac{2f''(x_i)h^3}{3!} + \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{5!} + \ldots \qquad (3.37)$$

เมื่อแทน A_i และ I_i ลงยังสมการ

$$E_i = A_i - I_i$$

จะได้

$$E_i = \left[2f(x_i)h + \frac{2f''(x_i)h^3}{3!} + \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{3\cdot 4!} + \ldots \right]$$

$$-\left[2f(x_i)h + \frac{2f''(x_i)h^3}{3!} + \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{5!} + \ldots \right]$$

$$= \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{3\cdot 4!} - \frac{2f^{(4)}(x_i)h^5}{5!} + \text{เทอมที่มี } h \text{ กำลังสูงกว่า } 7$$

ถ้า h มีค่าน้อยแล้ว ก็สามารถตัดเทอมที่ h^7 และสูงกว่าทิ้งไปได้ ดังนั้น ความผิดพลาดที่เกิดจากการคำนวณหาพื้นที่ของรูปเหลี่ยมที่ i คือ

$$E_i \approx f^{(4)}(x_i)h^5 \left| \frac{2}{3\cdot 4!} - \frac{2}{5!} \right| = \frac{1}{90} f^{(4)}(x_i)h^5$$

ถ้าให้ $\left| f^{(4)}(x_i) \right| \leq M$

แล้ว $\left| E_i \right| \leq \frac{h^5}{90} M$

ถ้าช่วงการหาพื้นที่เริ่มจาก a ถึง b แบ่งช่วง (a,b) ออกเป็น n ช่วงย่อยๆ เท่ากันและระยะห่างระหว่าง ordinate เท่ากับ h แล้ว แสดงว่าได้มีการหาพื้นที่ของฟังก์ชั่นในช่วง (a,b) เท่ากับ $n/2$ ครั้ง

ดังนั้น $$|E| \leq \frac{n}{2} \cdot \frac{h^5}{90} M$$

$$\leq \frac{hnh^4}{2 \times 90} M$$

$$\leq \frac{(b-a)}{180} h^4 M$$

นี่แสดงว่า ความผิดพลาดที่เกิดจากการใช้กฎของ Simpson เป็นปฏิภาคโดยตรงกับ h^4

3.4.6 รอมเบอร์กอินทีเกรชั่น (Romberg integration)

วิธีที่ใช้หาค่าประมาณของอินทีกรัลจำกัดเขตกันอย่างกว้างขวางอีกวิธีหนึ่ง คือ Romberg integration วิธีนี้ประกอบด้วยกระบวนการหาค่าแทรก ที่เริ่มต้นจากกฎของ Trapezoidal นั่นคือ

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}\left| f(a) + f(b) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) \right|$$

เมื่อ $h = (b-a)/m$ และ $x = a + jh$ และเป็นที่ทราบกันดีแล้วว่า ความผิดพลาดจากการลดเทอม (truncation error) จะลดลงขณะที่ค่าของ m เพิ่มขึ้น และการเพิ่มของ m จะมีลักษณะเป็น

$$m = 2^{k-1} \quad \text{เมื่อ} \quad k = 1, 2, 3, ..., n$$

เมื่อ n เป็นเลขจำนวนเต็มบวก ค่าของ h ในกระบวนการนี้ต้องลดลงในลักษณะของ

$$h_k = \frac{b-a}{2^{k-1}} \quad \text{เมื่อ} \quad k = 1, 2, 3, ..., n$$

เพื่อความสะดวก จะเขียนผลลัพธ์ประมาณของอินทีกรัลเป็น $R_{k,1}$ ซึ่ง

$$R_{1,1} = \frac{h_1}{2}\left[f(a) + f(b) \right]$$

$$R_{2,1} = \frac{h_2}{2}\left[f(a) + f(b) + 2f(a + h_2) \right]$$

$$R_{3,1} = \frac{h_3}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\left\{ f(a + h_3) + f(a + 2h_3) + f(a + 3h_3) \right\} \right]$$

โดยทั่วไปแล้ว สามารถเขียนเทอมเหล่านี้อยู่ในรูป

$$R_{k,1} = \frac{1}{2}\left| R_{k-1,1} + h_{k-1} \sum_{i=1}^{2^{k-2}} (f(a) + (i - 0.5)h_{k-1}) \right|$$

เมื่อ $k = 2, 3, ..., n$

ความสัมพันธ์นี้สามารถใช้เร่งความเร็วของการคำนวณ $R_{k,1}$ แต่ละตัว แม้ว่าขณะที่ k เพิ่มขึ้น ความเที่ยงตรงของ $R_{k,1}$ จะเพิ่มขึ้นด้วยก็ตาม แต่ว่าการลู่เข้าสู่ค่าที่ถูกต้องของอินทีกรัลช้า การเร่งกระบวนการลู่เข้าให้เร็วยิ่งขึ้น อาจใช้การหาค่าแทรกของ Richardson

$$R_{ij} = \frac{2^{2(j-1)} R_{i,j-1} - R_{i-1,j-1}}{2^{2(j-1)} - 1}$$

สำหรับ $i = 2, 3, ..., n \; ; \; j = 1, 2, ..., i$

ดังนั้น ผลลัพธ์ประมาณของวิธี Romberg โดยทั่วไปเขียนอยู่ในรูปของสามเหลี่ยมต่อไปนี้

$$\begin{array}{llll} R_{1,1} & & & \\ R_{2,1} & R_{2,2} & & \\ R_{3,1} & R_{3,2} & R_{3,3} & \\ R_{4,1} & R_{4,2} & R_{4,3} & R_{4,4} \\ . & & & \\ . & & & \\ . & & & \\ R_{n,1} & R_{n,2} & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & R_{nn} \end{array}$$

โดยเป็นการแสดงว่าเทอมแนวเส้นทแยงมุมเข้าสู่ค่าของอินทีกรัลได้รวดเร็วกว่าเทอม $R_{n,1}$ ปกติแล้วในการหาค่าประมาณตามวิธีของ Romberge มักจะดำเนินการกระทำซ้ำชนตารางไปจนได้ค่าในแต่ละแถว ซึ่งเกิดผลต่างระหว่าง $R_{n,n}$ กับ $R_{n-1,n-1}$ น้อยกว่าค่าความผิดพลาดที่ตั้งไว้

3.4.7 สูตรของ Newton-Cotes

สูตรที่เป็นโพลิโนเมียลอันดับหนึ่งหรือสองที่เคยเห็นมา อาจขยายให้เป็นโพลิโนเมียลอันดับสูงกว่า (higher-order) ผลลัพธ์ที่อยู่ในรูปทั่ว ๆ ไปคือ

$$\int_a^b f(x)dx = C_0 h \sum_{i=0}^{n} W_i f_i + C_1 h^{k+1} f^{(k)}(x^*)$$

เมื่อ n เป็นจำนวนของแถบย่อย, k เป็นอันดับของโพลิโนเมียลที่ใช้, x^* เป็นจุดบางจุดอยู่ภายในช่วง $[a, b]$, $f^{(k)}(x^*)$ เป็นอนุพันธ์อันดับที่ k ของฟังก์ชั่น $f(x)$ ซึ่งหาค่าที่ x^* และ h เป็นความกว้างของช่วงข้อมูล สัมประสิทธิ์ C_0, C_1 และ W_i ได้แสดงไว้ในตารางที่ 3.3

ในแต่ละแถวของตาราง 3.3 แทนไซเคิลของแถบ (strip) k รวมทั้งจุด pivotal $(k+1)$ จุด เพื่อให้ได้โพลิโนเมียลอันดับที่ k ถ้าการใช้ข้อมูลนี้กับปัญหาที่มีไซเคิล (cycle) มากกว่าหนึ่ง (เช่น $k=2$ และ $n=6$) แล้ว สัมประสิทธิ์ที่ได้จะเกิดจากการนำค่าปลายมาบวกกัน ซึ่งค่าถ่วงน้ำหนักจะซ้อนกัน (overlap) ดังตารางที่ 3.4

ตารางที่ 3.3 สัมประสิทธิ์สำหรับสูตรของ Newton - Cotes

k	C_0	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6	W_7	W_8	C_1
1	$\frac{1}{2}$	1	1								$\frac{1}{12}$
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1							$\frac{1}{90}$
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1						$-\frac{3}{80}$
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7					$-\frac{8}{945}$
5	$\frac{5}{288}$	19	75	50	50	75	19				$-\frac{275}{12096}$
6	$\frac{1}{140}$	41	216	27	272	27	216	41			$-\frac{9}{1400}$
7	$\frac{7}{17280}$	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751		$-\frac{8183}{518400}$
8	$\frac{4}{14175}$	989	5888	-928	10946	-4540	10946	-928	5888	989	$-\frac{2368}{467775}$

ตารางที่ 3.4 ลำดับการพิจารณาค่าถ่วงน้ำหนักที่มีการซ้อนกัน

	W_0	W_1	W_2	W_3	W_4	W_5	W_6
	1	4	1				
			1	4	1		
					1	4	1
sum	1	4	2	4	2	4	2

ดังนั้น จะได้

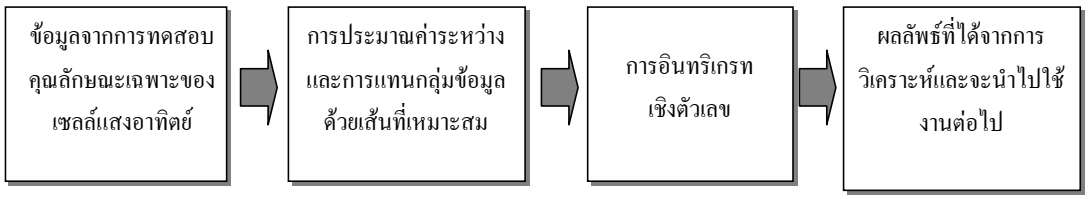
$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\left[y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + 4y_5 + y_6\right] + C_1 h^3 f^{(2)}(x^*)$$

ซึ่งสอดคล้องกับผลลัพธ์ที่ได้เคยเสนอไว้ สำหรับเทอมสุดท้ายในสูตรของ Newton-Cotes คือ $C_1 h^{k+1} f^{(k)}(x^*)$

เป็นเทอมที่บอกขนาดของความผิดพลาดที่เกิดจากการประมาณค่า และจะเห็นได้ชัดเจนว่า ขณะที่ h มีค่าน้อยลงแล้ว h^{k+1} จะยิ่งน้อยมากขึ้น แต่ยังต้องคำนึงถึง เนื่องจากความผิดพลาดนั้นย่อมขึ้นอยู่กับ $f^{(k)}(x^*)$ ด้วยเหมือนกันเพราะมีบางฟังก์ชั่นที่อนุพันธ์อันดับสูงของมันมีค่าสูงมาก ฉะนั้น ฟังก์ชั่นเหล่านี้ความผิดพลาดอาจจะไม่ลดลง เมื่อเพิ่มค่าของ k

3.5 บทสรุป

การนำระเบียบวิธีเชิงตัวเลขมาใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลที่ได้จากการทดสอบ



รูปที่ 3.7 อัลกอริทึมของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขที่ใช้ในการวิเคราะห์ระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์

โดยการนำรูปแบบ และวิธีการของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขข้างต้นไปใช้งาน สำหรับจำลองการทำงาน และการวิเคราะห์ระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์ในหัวข้อต่างๆ เช่น

- นำไปใช้ในการวิเคราะห์ด้านการจ่ายพลังงานของระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์ เมื่อมีรูปแบบการติดตั้ง และมุมเอียงในการติดตั้งที่มีลักษณต่างกัน
- วิเคราะห์ถึงการเปลี่ยนจุดกำลังสูงสุดและการดึงพลังงานสูงสุดของระบบฯ เมื่อมีการต่อร่วมเซลล์แสงอาทิตย์ทั้งแบบอนุกรม และขนาน
- ช่วยในการออกแบบหาปริมาณการจ่ายกระแสของระบบฯ สำหรับโหลดที่มีการใช้งานต่อเนื่อง
- การพิจารณาปริมาณกระแสขณะดำเนินการ อัดประจุ และปล่อยประจุของแบตเตอรี่ในระบบไฟฟ้าแสงอาทิตย์ เพื่อการวิเคราะห์เปรียบเทียบค่า

เป็นต้น