การวิเคราะห์ความผิดพลาดจากการปัดเศษของการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสัน สำหรับสมการเชิงอนุพันธ์: อนุพันธ์อันดับที่หนึ่ง

Round-off Error Analysis of the Richardson's Extrapolation for the Differential Equations: First-Order Derivative

นิวัฒน์ ภู่เจริญ[1, 2*] , จารุวัตร เจริญสุข[1*] และ อุนนัต พิณโสภณ[1]
[1] สาขาวิชาวิศวกรรมเครื่องกล คณะวิศวกรรมศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง กรุงเทพฯ 10520
โทร 02-7373000 ต่อ 3504 โทรสาร 02-7392490 *อีเมล์ kcjarruw@kmitl.ac.th
[2] สำนักวิจัยและบริการคอมพิวเตอร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง กรุงเทพฯ 10520
โทร 02-3264329 โทรสาร 02-3264335 *อีเมล์ kpniwat@kmitl.ac.th

Niwat Phoocharoen[1, 2*] , Jarruwat Charoensuk[1*] and Unnat Pinsopon[1]
[1] Mechanical Engineering Department, Engineering Division, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, 10520, Thailand, Tel: 02-7373000 ext. 3504, Fax: 02-7392490, *E-mail: kcjarruw@kmitl.ac.th
[2] Computer Research and Service Center, King Mongkut's Institute of Technology Ladkrabang, Bangkok, 10520, Thailand, Tel: 02-3264329, Fax: 02-3264335, *E-mail: kpniwat@kmitl.ac.th

บทคัดย่อ

จากปัญหาการประมาณค่าอนุพันธ์ของวิธีผลต่างสืบเนื่องอันเกิดจากการลบกันของพจน์ที่ขนาดระยะคำนวณเล็กมากๆ ส่งผลให้การประมาณค่าอนุพันธ์เกิดความผิดพลาดหรือที่รู้จักกันในชื่อความผิดพลาดจากการปัดเศษ ดังนั้นในบทความนี้ได้ทำการศึกษาความผิดพลาดจากการปัดเศษของวิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสัน ซึ่งวิธีดังกล่าวอยู่บนพื้นฐานเดียวกันกับวิธีผลต่างสืบเนื่อง โดยหัวข้อวิจัยได้ตั้งสมมุติฐานว่าถ้าใช้วิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสันซึ่งมีความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับสูงกว่าจะสามารถใช้ขนาดระยะคำนวณที่มีขนาดเล็กกว่าวิธีผลต่างสืบเนื่องแบบผลต่างกึ่งกลางแล้วเกิดความผิดพลาดจากการปัดเศษลดน้อยลงได้หรือไม่ โดยทดลองประมาณค่าอนุพันธ์อันดับที่หนึ่งเปรียบเทียบกันสี่วิธีดังนี้ วิธีผลต่างสืบเนื่องแบบผลต่างกึ่งกลางความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สอง, วิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสันความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สี่, วิธีช่วงเชิงซ้อนความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สองและผลเฉลยแม่นตรง ผลลัพธ์จากการคำนวณแสดงให้เห็นว่าความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับสูงไม่ได้ช่วยลดความผิดพลาดจากการปัดเศษแต่ช่วยเพิ่มความแม่นยำในการประมาณค่าซึ่งเป็นเรื่องปกติของวิธีที่มีการตัดปลายอันดับสูง ส่วนระเบียบวิธีการคำนวณช่วงเชิงซ้อนสามารถลดความผิดพลาดจากการปัดเศษได้ดีกว่าในขนาดระยะคำนวณเล็กกว่า 10^{-7} แต่ให้ความแม่นยำในการประมาณค่าน้อยกว่าในขนาดระยะคำนวณใหญ่กว่า 10^{-6}

อย่างไรก็ตามระเบียบวิธีการคำนวณที่ไม่ก่อให้เกิดการลบกันของพจน์น่าจะเป็นหัวใจสำคัญในการพัฒนาระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในการแก้ปัญหาความผิดพลาดจากการปัดเศษ โดยในอนาคตจะทำการศึกษาหาระเบียบวิธีการรวมกันระหว่างวิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสันและวิธีช่วงเชิงซ้อนเข้าด้วยกันซึ่งวิธีนี้อาจจะช่วยลดปัญหาความผิดพลาดรวมของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขได้ดีขึ้นตามลำดับต่อไป

Abstract

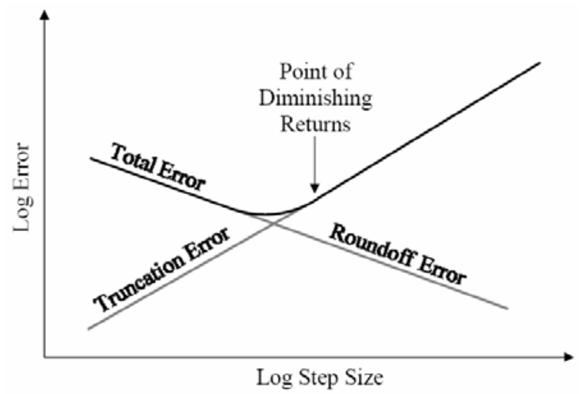
A problem usually encountered in a finite difference method caused by substitution of values between two points of a very small step size is usually known as round-off error. In this paper, the error from Richardson's extrapolation, which inherits from finite difference method, was analyzed. With the assumption that truncation of higher-order term in Richardson's extrapolation may contribute to a decrease in round-off error at smaller step size. To investigate this assumption, the first order derivative was numerically obtained from different numerical methods namely; the 2^{nd} order central difference, the 4^{th} order Richardson's

extrapolation, the 2nd order complex-step derivative approximation. These numerical results were then compared with the exact solution. The results suggest that higher truncation term of Richardson's extrapolation can, although, reduce the error of numerical approximation, does not contribute to the reduction of round-off error. The complex-step derivative approximation perform better than others for step size less than 10^{-7}, but, due to lower order of approximation, perform equally with the 2nd order central differencing scheme with the step size of 10^{-6} and above.

Nevertheless, it is desirable to avoid subtraction of terms thus can reduce round-off errors in a numerical method. Future work will deals with a combination of the complex-step derivative approximation and Richardson's extrapolation. It is hoped that the total numerical error will be reduced with such combination.

1. บทนำ

จากปัญหาความผิดพลาดรวมของระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในการแบ่งขนาดระยะคำนวณ อันเกิดจากความสัมพันธ์ของความผิดพลาดจากการตัดปลายและขนาดระยะของการคำนวณ โดยขนาดระยะยิ่งมีขนาดเล็กความผิดพลาดยิ่งน้อย รวมกับความสัมพันธ์ของความผิดพลาดจากการปัดเศษและขนาดระยะ โดยขนาดระยะยิ่งมีขนาดเล็กความผิดพลาดยิ่งมาก ตามลำดับดังรูปที่ 1 [1]



รูปที่ 1 ความผิดพลาดกับขนาดระยะ

ดังนั้นในบทความนี้ได้ทำการศึกษาผลกระทบของความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับสูงต่อความผิดพลาดจากการปัดเศษของการประมาณค่าอนุพันธ์ของวิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสัน โดยเปรียบเทียบกับวิธีที่ได้กล่าวมาแล้วข้างต้น

2. ทฤษฎี

การพัฒนาวิธีการประมาณค่าสมการเชิงอนุพันธ์ทั้งสามวิธีที่จะได้กล่าวต่อไปนี้อยู่บนพื้นฐานเดียวกันคือ การประมาณค่าสมการเชิงอนุพันธ์ด้วยการกระจายอนุกรมเทย์เลอร์ ดังนี้

2.1 วิธีผลต่างสืบเนื่องแบบผลต่างกึ่งกลาง

การกระจายอนุกรมเทย์เลอร์ [1]

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + \frac{f'(x_i)}{1!}h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^4(x_i)}{4!}h^4 + \frac{f^5(x_i)}{5!}h^5 + \cdots \tag{1}$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - \frac{f'(x_i)}{1!}h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^4(x_i)}{4!}h^4 - \frac{f^5(x_i)}{5!}h^5 + \cdots \tag{2}$$

นำสมการที่ (1)-(2) ได้

$$f'(x_i) \approx [f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})]/2h + O(h^2) \tag{3}$$

สมการที่สามเรียกว่าวิธีผลต่างสืบเนื่องแบบผลต่างกึ่งกลางมีความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สอง

2.2 วิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสัน

วิธีการประมาณค่านี้ถูกพัฒนาโดย L.F. Richardson และ J.A. Gaunt ในปี 1927 และถูกนำมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณเชิงตัวเลขตามมาดังนี้ ในปี 2003 Maria Caridad Natividad และ Martin Stynes [6] นำมาปรับปรุงความแม่นยำของวิธีการประมาณค่าด้วยอัปวินด์ ต่อมาในปี 2004 Armando Arciniega และ Edward Allen [5] นำมาปรับปรุงวิธีแบบปริยายและวิธีของแครงก์-นิโคลสันให้มีอันดับความแม่นยำสูงขึ้นและยังช่วยลดเวลาในการคำนวณได้อีกด้วยและในปี 2006 Kumar Rahul และ S.N. Bhattacharyya [4] นำมาปรับปรุงความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับสูงให้มีความแม่นยำมากขึ้น

ขั้นตอนและวิธีคำนวณการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสันโดยอาศัยหลักการของการกระจายอนุกรมเทย์เลอร์ ดังนี้
นำสมการที่ (1)-(2) ได้

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = 2\frac{f'(x_i)}{1!}h + 2\frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + 2\frac{f^5(x_i)}{5!}h^5 + \cdots \tag{4}$$

นำ $2h$ หารตลอดสมการที่ (4) จะได้

$$\frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} = \frac{f'(x_i)}{1!} + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^2 + \frac{f^5(x_i)}{5!}h^4 + \cdots \tag{5}$$

ย้ายข้างหาอนุพันธ์อันดับที่หนึ่ง

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{f'''(x_i)}{3!}h^2 - \frac{f^5(x_i)}{5!}h^4 - \cdots \tag{6}$$

เปลี่ยนสมการที่ (6) ให้เป็นตัวดำเนินการของริชาร์ดสัน

$$\varphi(h)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h} \tag{7}$$

และเปลี่ยนสัมประสิทธิ์หน้า h^n ให้เป็น a_n ตามลำดับ จะได้

$$f'(x_i)=\varphi(h)-a_2h^2-a_4h^4-\cdots \tag{8}$$

ย้ายข้างหาตัวดำเนินการของริชาร์ดสัน

$$\varphi(h)=f'(x_i)+a_2h^2+a_4h^4+\cdots \tag{9}$$

หาตัวดำเนินการของริชาร์ดสันที่ $h/2$

$$\varphi\left(\frac{h}{2}\right)=f'(x_i)+a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2+a_4\left(\frac{h}{2}\right)^4+\cdots \tag{10}$$

คูณ 4 ตลอดสมการที่ (10)

$$4\varphi\left(\frac{h}{2}\right)=4f'(x_i)+a_2h^2+a_4\frac{h^4}{4}+\cdots \tag{11}$$

นำสมการที่ (9)-(11) ได้

$$\begin{aligned}\varphi(h)-4\varphi\left(\frac{h}{2}\right)&=f'(x_i)-4f'(x_i)\\&\quad+a_4h^4-a_4\frac{h^4}{4}+\cdots\end{aligned} \tag{12}$$

จัดรูปใหม่เป็น

$$\varphi(h)-4\varphi\left(\frac{h}{2}\right)=-3f'(x_i)+\frac{3}{4}a_4h^4+\cdots \tag{13}$$

นำ -3 หารตลอดสมการที่ (13) จะได้

$$-\frac{1}{3}\varphi(h)+\frac{4}{3}\varphi\left(\frac{h}{2}\right)=f'(x_i)-\frac{1}{4}a_4h^4-\cdots \tag{14}$$

ย้ายข้างหาสมการอนุพัธ์อันดับที่หนึ่งของริชาร์ด

$$f'(x_i)=\frac{4}{3}\varphi\left(\frac{h}{2}\right)-\frac{1}{3}\varphi(h)+\frac{1}{4}a_4h^4+\cdots \tag{15}$$

เขียนสมการที่ (15) ให้อยู่ในรูปของสมการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับที่หนึ่งของริชาร์ดสัน

$$f'(x_i)\approx\frac{4}{3}\varphi\left(\frac{h}{2}\right)-\frac{1}{3}\varphi(h)+O\left(h^4\right) \tag{16}$$

สมการที่ (16) เรียกว่าสมการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสันแบบมาตรฐานมีความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สี่

2.3 วิธีการประมาณค่าแบบช่วงเชิงซ้อน [2]

วิธีการประมาณค่าแบบช่วงเชิงซ้อนถูกนำเสนอโดย Lyness และ Moler ในปี 1967 และถูกนำมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณเชิงตัวเลขตามมาดังนี้ ในปี 2000 Joaquim R. R. A. Martins [8] และคณะนำมาประยุกต์ใช้กับวิธีไฟไนต์เอลิเมนต์และการคำนวณพลศาสตร์การไหล โดยทำการเปรียบเทียบกับวิธีผลต่างสืบเนื่องและวิธีผลต่างอัตโนมัติ พบว่าวิธีช่วงเชิงซ้อนง่ายและคำนวณได้ดีกว่า ต่อมาในปี 2002 X. W. Gao [7] และคณะนำมาประยุกต์ใช้กับวิธีขอบเขตมูลฐานแบบไม่เชิงเส้นในการแก้ปัญหาความเค้นภายในพบว่ามีความแม่นยำสูงและในปี 2007 S. Kapadia [3] และคณะนำมาประยุกต์ใช้ในการคำนวณหาสภาวะที่เหมาะสมสำหรับเซลล์เชื้อเพลิงแบบออคไซด์แข็ง

ขั้นตอนและวิธีคำนวณการประมาณค่าแบบช่วงเชิงซ้อนโดยอาศัยหลักการของการกระจายอนุกรมเทย์เลอร์แบบตัวแปรเชิงซ้อน ดังนี้

$$f(z)=f(x+ih) \tag{17}$$

กระจายอนุกรมเทย์เลอร์ในรูปตัวแปรเชิงซ้อน

$$\begin{aligned}f(x+ih)&=f(x)+i\frac{f'(x)}{1!}h-\frac{f''(x)}{2!}h^2\\&\quad-i\frac{f'''(x)}{3!}h^3+\cdots\end{aligned} \tag{18}$$

พิจารณาเฉพาะเทอมจินตภาพ จะได้

$$\mathrm{Im}[f(x+ih)]=\frac{f'(x)}{1!}h-\frac{f'''(x)}{3!}h^3+\cdots \tag{19}$$

นำ h มาหารตลอดสมการที่ (19) ได้

$$\mathrm{Im}[f(x+ih)]/h=f'(x)-\frac{f'''(x)}{3!}h^2+\cdots \tag{20}$$

ย้ายข้างหาสมการอนุพันธ์อันดับที่หนึ่งของวิธีแบบช่วงเชิงซ้อน

$$f'(x)=\mathrm{Im}[f(x+ih)]/h+\frac{f'''(x)}{3!}h^2-\cdots \tag{21}$$

เขียนสมการที่ (21) ให้อยู่ในรูปของสมการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับที่หนึ่งของวิธีแบบช่วงเชิงซ้อน

$$f'(x)\approx\mathrm{Im}[f(x+ih)]/h+O\left(h^2\right) \tag{22}$$

สมการที่ (22) เรียกว่าวิธีการประมาณค่าแบบช่วงเชิงซ้อนมีความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับที่สอง

2.4 วิธีผลเฉลยแม่นตรง

การหาค่าอนุพันธ์ด้วยวิธีผลเฉลยแม่นตรงเป็นวิธีการหาโดยตรงจากสูตรที่มีอยู่ทางคณิตศาสตร์

ฟังค์ชันที่ใช้ในการทดสอบ [2]

$$f(x) = \exp(x) / \left[\sin(x)^3 + \cos(x)^3\right] \qquad (23)$$

ผลเฉลยแม่นตรงของอนุพันธ์อันดับที่หนึ่ง

$$f'(x) = \frac{\exp(x)}{\sin(x)^3 + \cos(x)^3} - \frac{\exp(x)\left[3\sin(x)^2\cos(x) - 3\cos(x)^2\sin(x)\right]}{\left[\sin(x)^3 + \cos(x)^3\right]^2} \qquad (24)$$

3. ผลลัพธ์จากการคำนวณ

ผลลัพธ์จากการคำนวณทั้งสามวิธีได้แสดงในตารางที่หนึ่งและกำหนดให้ความผิดพลาดจากการปัดเศษทศนิยมตำแหน่งที่สิบห้า โดยผลเฉลยแม่นตรง $f'(x) = 3.622033700716326$ ที่ตำแหน่ง $x = 1.5$

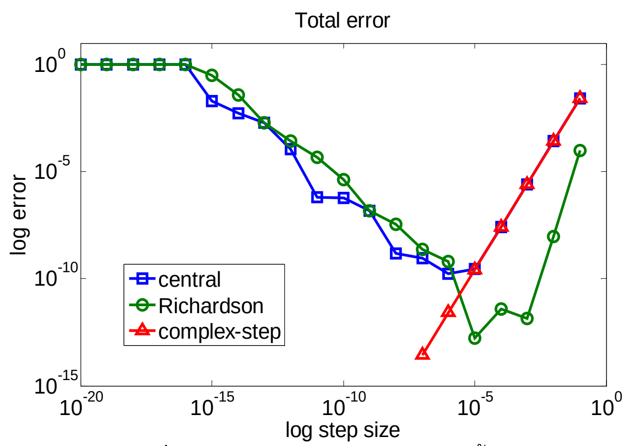
ตารางที่ 1 เปรียบเทียบความผิดพลาดกับขนาดระยะ

h	central	Richardson	complex-step
1.0e-01	0.026545932532872	0.000098697258762	0.025767852429948
1.0e-02	0.000261561985270	0.000000009725947	0.000261484189191
1.0e-03	0.000002615234714	0.000000000001354	0.000002615226937
1.0e-04	0.000000026150418	0.000000000003918	0.000000026152308
1.0e-05	0.000000000277742	0.000000000000169	0.000000000261523
1.0e-06	0.000000000175907	0.000000000641478	0.000000000002615
1.0e-07	0.000000000927563	0.000000002341976	0.000000000000027
1.0e-08	0.000000001524591	0.000000034219977	0.000000000000000
1.0e-09	0.000000145604645	0.000000145604645	0.000000000000000
1.0e-10	0.000000590041536	0.000004314266337	0.000000000000000
1.0e-11	0.000000636035432	0.000048407043296	0.000000000000000

ตารางที่ 1 เปรียบเทียบความผิดพลาดกับขนาดระยะ (ต่อ)

h	central	Richardson	complex-step
1.0e-12	0.000110982962570	0.000274459891664	0.000000000000000
1.0e-13	0.001973347883374	0.001973347883374	0.000000000000000
1.0e-14	0.005383113925840	0.038078499744566	0.000000000000000
1.0e-15	0.019138425438205	0.307815432749060	0.000000000000000
1.0e-16	1.000000000000000	1.000000000000000	0.000000000000000
1.0e-17	1.000000000000000	1.000000000000000	0.000000000000000
1.0e-18	1.000000000000000	1.000000000000000	0.000000000000000
1.0e-19	1.000000000000000	1.000000000000000	0.000000000000000
1.0e-20	1.000000000000000	1.000000000000000	0.000000000000000

เปรียบเทียบผลการคำนวณความผิดพลาดกับขนาดระยะทั้งสามวิธีด้วยกราฟลอกะริธึม-ลอกะริธึมเพื่อให้เห็นความแตกต่างของวิธีคำนวณให้ชัดเจนมากยิ่งขึ้น



รูปที่ 2 เปรียบเทียบความผิดพลาดของทั้งสามวิธี

4. การวิเคราะห์ผลการคำนวณ

จากตารางที่หนึ่งและรูปที่สองของกรณีศึกษาจะทำการวิเคราะห์ผลการคำนวณทั้งสามวิธีแยกเป็นส่วนๆในแต่ละวิธีดังนี้

1. วิธีผลต่างสืบเนื่องแบบผลต่างกึ่งกลาง

วิธีผลต่างกึ่งกลางมีความแม่นยำใกล้เคียงกับวิธีช่วงเชิงซ้อนในช่วงแรกของการคำนวณก่อนการเกิดจุดวกกลับที่ $h_c = 1.0e-05$ แต่มีความแม่นยำน้อยกว่าวิธีริชาร์ดสันในช่วงแรกของการคำนวณก่อนถึงตำแหน่งจุดวกกลับที่ $h_R = 1.0e-05$

2. วิธีการประมาณค่านอกช่วงของริชาร์ดสัน
วิธีริชาร์ดสันมีความแม่นยำมากกว่าวิธีช่วงเชิงซ้อนในช่วงแรกของการคำนวณก่อนถึงจุดวกกลับที่ $h_R = 1.0e - 05$ และเกิดความผิดพลาดมากกว่าทั้งสองวิธีเนื่องจากอิทธิพลของความผิดพลาดจากการปัดเศษที่ $h_R = 1.0e - 06$ เป็นต้นไป
3. วิธีการประมาณค่าแบบช่วงเชิงซ้อน
วิธีช่วงเชิงซ้อนมีความแม่นยำมากกว่าทั้งสองวิธีตั้งแต่ขนาดระยะคำนวณ $h_{cx} = 1.0e - 07$ เป็นต้นไปและคำตอบจากการประมาณค่าตั้งแต่ $h_{cx} = 1.0e - 08$ มีค่าเท่ากับผลเฉลยแม่นตรง

5. สรุปผล

การประมาณค่าอนุพันธ์ที่มีความผิดพลาดจากการตัดปลายอันดับสูงของวิธีริชาร์ดสันไม่ได้ช่วยลดความผิดพลาดจากการปัดเศษ แต่ช่วยเพิ่มความแม่นยำขณะที่ใช้ขนาดระยะคำนวณเท่ากันแต่ไม่เกินขนาดระยะคำนวณของการเกิดจุดวกกลับ

6. กิตติกรรมประกาศ

ขอขอบพระคุณ รศ.ดร.มนัส สังวรศิลป์ ผู้อำนวยการสำนักวิจัยและบริการคอมพิวเตอร์ที่อนุเคราะห์โปรแกรม MATLAB ในการทำวิจัยในครั้งนี้

เอกสารอ้างอิง

[1] CHAPRA, CANALE, 1989. NUMERICAL METHODS for ENGINEERS. 2nd ed., McGraw-Hill, Singapore.
[2] WILLIAM SQUIRE, GEORGE TRAPP, 1998. USING COMPLEX VARIABLES TO ESTIMATE DERIVATIVES OF REAL FUNCTION. Vol. 40, No. 1, pp. 110-112, Society for Industrial and Applied Mathematics.
[3] S. Kapadia, W.K. Anderson, L. Elliott, C. Burdyshaw, 2007. Adjoint method for solid-oxide fuel cell simulations. Journal of Power Sources.
[4] Kumar Rahul, S.N. Bhattacharyya, 2006. One-sided finite-difference approximations suitable for use with Richardson extrapolation. Vol. 219, pp. 13-20, Journal of Computational Physics.
[5] Armando Arciniega, Edward Allen, 2004. Extrapolation of difference methods in option valuation. Vol. 153, pp. 165-186, Applied Mathematics and Computation.
[6] Maria Caridad Natividad, Martin Stynes, 2003. Richardson extrapolation for a convection–diffusion problem using a Shishkin mesh. Vol. 45, pp. 315-329, Applied Numerical Mathematics.
[7] X. W. Gao, D. D. Liu, P. C. Chen, 2002. Computation Of Internal Stresses In Nonlinear BEM Using A Numerically-Exact Complex-Variable Approach. Vol. BETEQ 2001, No. 3, pp. 303-310, Electronic Journal of Boundary Elements.
[8] Joaquim R. R. A. Martins, Ilan M. Kroo, Juan J. Alonso, 2000. AN AUTOMATED METHOD FOR SENSITIVITY ANALYSIS USING COMPLEX VARIABLES. AIAA