CS381: Numerical Computation & Softwares

Numerical Integration

Jakramate Bootkrajang

Department of Computer Science

Chiang Mai University

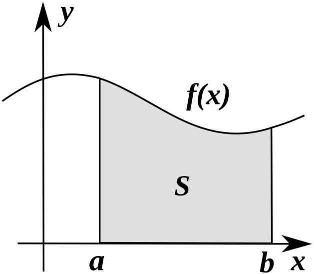
Quote of the day

"You cannot teach a man anything; you can only help him discover it in himself."

- Galileo -

Introduction

- ในบทนี้เราจะศึกษาการทำ numerical integration
- กล่าวโดยภาพรวม การทำ integration คือการหาพื้นที่ใต้กราฟ



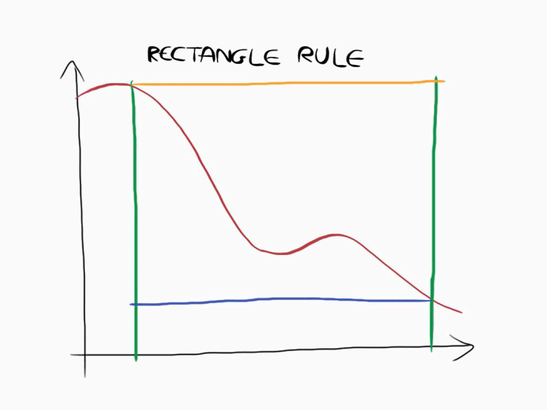
- Numerical integration ศึกษาการประมาณค่าของพื้นที่ดังกล่าวให้ใกล้เคียงความเป็นจริงที่สุด

Let’s think about it

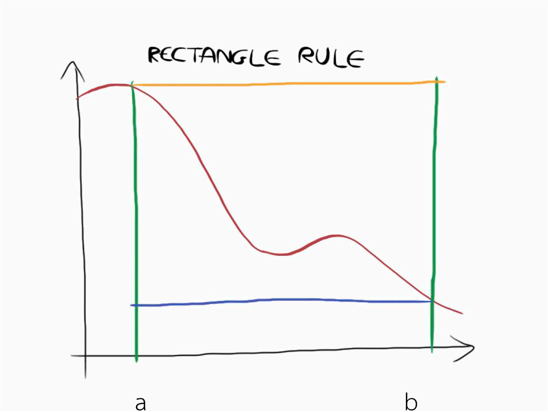
ให้นักศึกษาจับกลุ่มกัน 3-4 คน เพื่อออกแบบวิธีการที่จะสามารถนำมาใช้ในการประมาณพื้นที่ใต้กราฟได้

Integration using rectangle (1/4)

- วิธีที่ง่ายที่สุดในการประมาณ $\int_a^b f(x)\,dx$
- คือการใช้พื้นที่รูปสี่เหลี่ยมเป็นค่าประมาณ

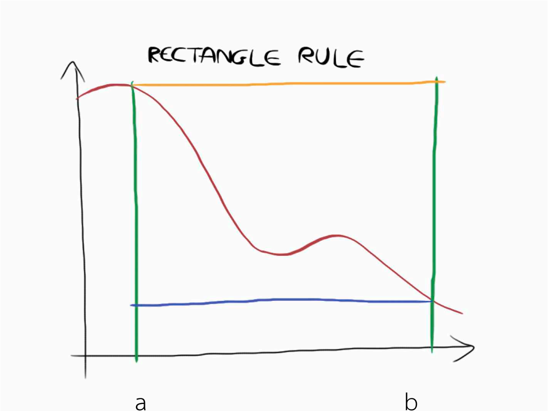


Integration using rectangle (2/4)



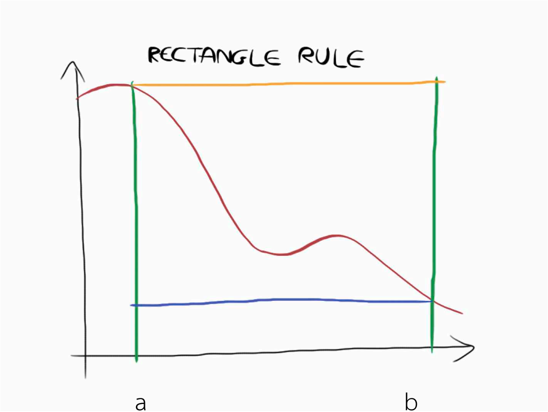
- พื้นที่สี่เหลี่ยมมีค่าเท่ากับ กว้าง × สูง
- สี่เหลี่ยมนี้กว้างเท่าไร สูงเท่าไร

Integration using rectangle (3/4)



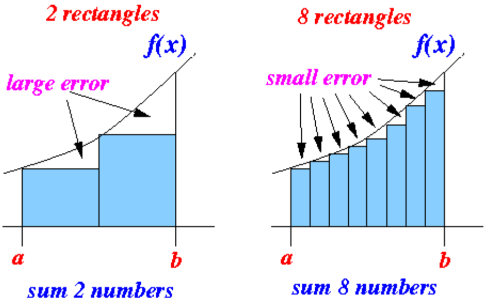
- หากเราใช้ความสูงเท่ากับเส้นสีส้ม เราจะได้ค่าประมาณคือ

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \max f(x) \cdot (b - a), x \in [a, b] \to f(a) \cdot (b - a)$$



- หากเราใช้ความสูงเท่ากับเส้นสีน้ำเงิน เราจะได้ค่าประมาณคือ $\int_a^b f(x)\,dx \approx \min f(x) \cdot (b-a), x \in [a,b] \rightarrow f(b) \cdot (b-a)$

Integration as a sum of rectangles



- การประมาณข้างต้นเป็นการประมาณอย่างง่าย ซึ่งไม่ค่อยแม่นยำมากนัก
- เราสามารถเพิ่มความแม่นยำได้โดย แบ่งสี่เหลี่ยมใหญ่ออกเป็นสี่เหลี่ยมเล็กๆหลายๆอัน

Simple rectangle rule

- หากเราแบ่งช่วง a, b ออกเป็น N ช่วง โดยมีจุดแบ่งคือ $x_1, x_2, x_3, \ldots, x_{n+1}$ เราสามารถแสดง พื้นที่ประมาณในเชิงคณิตศาสตร์ได้ว่า (เมื่อใช้ค่า min)

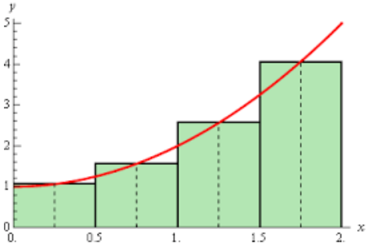
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} \min_{x \in [x_i, x_{i+1}]} f(x)(x_{i+1} - x_i)$$

- หรือหากใช้ค่า max

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]} f(x)(x_{i+1} - x_i)$$

- การประมาณจะแม่นยำมากขึ้นเมื่อระยะระหว่าง x_i ถึง x_{i+1} น้อยลง

Midpoint method



- บางครั้งการหาค่ามากที่สุด หรือน้อยที่สุดในช่วง x_i ถึง x_{i+1} อาจทำได้ยาก
- เราอาจใช้ค่าเฉลี่ยของฟังก์ชัน ณ จุด x_i และ x_{i+1} มาใช้แทนความสูงของสี่เหลี่ยมได้

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right)(x_{i+1}-x_i)$$

Midpoint method example

ตัวอย่างการอินทิเกรต $\int_0^1 \cos x dx = \sin 1 - \sin 0 \approx 0.8414709848$

h	$I_{mid}(h)$	Error
0.500000	0.85030065	-8.8×10^{-3}
0.250000	0.84366632	-2.2×10^{-3}
0.125000	0.84201907	-5.5×10^{-4}
0.062500	0.84160796	-1.4×10^{-4}
0.031250	0.84150523	-3.4×10^{-5}
0.015625	0.84147954	-8.6×10^{-6}
0.007813	0.84147312	-2.1×10^{-6}
0.003906	0.84147152	-5.3×10^{-7}
0.001953	0.84147112	-1.3×10^{-7}
0.000977	0.84147102	-3.3×10^{-8}

Error analysis

- เราอยากทราบว่าในทางทฤษฎีแล้วการประมาณ integral โดยใช้ midpoint method จะมีความแม่นยำเพียงใด
- โชคดีว่าการทำ numerical integration เกิด numerical error น้อยมาก ดังนั้นแล้ว error ส่วนใหญ่จะเป็น mathematical error
- แนวทางการวิเคราะห์ error คือ
  - หา error ของการประมาณแต่ละช่วง (local error)
  - นำ local error มารวมกัน เพื่อหาความคลาดเคลื่อนรวมของทุกช่วง (global error)

Local error

- สิ่งที่เราต้องการหาคือ ผลต่างของ ค่า integral กับค่าประมาณ

$$error = \left| \int_a^b f(x)\,dx - f(c)(b-a) \right| \quad c = \frac{a+b}{2}$$

Taylor expansion (again)

- ก่อนอื่นลองหา Taylor expansion ของ $f(x)$ (ค่าฟังก์ชันจริงๆ) ณ จุด a

$$f(x) = f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2} f''(\xi_1) \tag{1}$$

- Integrate taylor expansion ข้างบนจะได้ว่า

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \left[f(a) + (x-a)f'(a) + \frac{(x-a)^2}{2} f''(\xi_1) \right] dx \tag{2}$$

$$= f(a)(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2} f'(a) + \frac{1}{2} \int_a^b (x-a)^2 f''(\xi_1)\,dx \tag{3}$$

- Eq.3 คือค่า integral ที่ควรจะเป็น

Taylor expansion (again)

- Taylor expansion ของ $f(c)$ (ค่าประมาณ) โดยที่ $c = \frac{a+b}{2}$ ณ จุด a คือ

$$f(c) = f(a) + (c-a)f'(a) + \frac{(c-a)^2}{2} f''(\xi_2) \tag{4}$$

- นำ $(b-a)$ คูณทั้งซ้ายและขวา

$$\begin{aligned} f(c)(b-a) &= f(a)(b-a) + (c-a)(b-a)f'(a) \\ &\quad + \frac{(c-a)^2}{2}(b-a)f''(\xi_2) \qquad (5) \\ &= f(a)(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2} f'(a) + \frac{(b-a)^3}{8} f''(\xi_2) \qquad (6) \end{aligned}$$

- Eq.6 คือค่า integral ของวิธี midpoint method

- ค่า error ก็คือค่าของ Eq.(3) ลบ Eq.(6)

$$Eq.3 = f(a)(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2} f'(a) + \frac{1}{2}\int_a^b (x-a)^2 f''(\xi_1)\,dx$$

$$Eq.6 = f(a)(b-a) + \frac{(b-a)^2}{2} f'(a) + \frac{(b-a)^3}{8} f''(\xi_2)$$

- ผลลัพธ์คือ

$$\left|\frac{1}{2}\int_a^b (x-a)^2 f''(\xi_1)\,dx - \frac{(b-a)^3}{8} f''(\xi_2)\right|$$

Local Error bound

- หากให้ M แทนอนุพันธ์ลำดับสองของ $f()$ ที่มากที่สุดในช่วง a, b เราจะได้ว่า
- $M = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$

$$
\begin{aligned}
&\left|\frac{1}{2}\int_a^b (x-a)^2 f''(\xi_1)\,dx - \frac{(b-a)^3}{8} f''(\xi_2)\right| && (7)\\
&\le \frac{1}{2}\int_a^b (x-a)^2 M dx + \frac{(b-a)^3}{8} M && (8)\\
&= \frac{M}{6}(b-a)^3 + \frac{M}{8}(b-a)^3 \\
&= \frac{7M}{24}(b-a)^3 && (9)
\end{aligned}
$$

- Important: เราสามารถลด error โดยการลดระยะห่างระหว่าง b กับ a !!

Error ทั้งหมดก็คือผลรวมของ error ของแต่ละช่วง

$$error_{global} = \left| \sum_{i=1}^{N} \frac{7M_i}{24}(x_{i+1} - x_i)^3 \right| \tag{10}$$

$$\leq \sum_{i=1}^{N} \left| \frac{7M_i}{24}(x_{i+1} - x_i)^3 \right| \tag{11}$$

$$\leq \sum_{i=1}^{N} \frac{7|M|}{24}(x_{i+1} - x_i)^3 \tag{12}$$

$$= \frac{7}{24} h^3 NM \tag{13}$$

ในที่นี้ให้ M คือ ค่าที่มากที่สุดของ M_i ของแต่ละช่วง และ h คือความกว้างของช่วง (ที่สมมุติว่าเท่ากัน)

Finding a good h

เราสามารถเขียน Eq.(13) ใหม่โดยสังเกตว่า $h = (b-a)/N$, $hN = (b-a)$

$$\begin{aligned} error_{global} &= \frac{7}{24}h^3 NM \\ &= (b-a)\frac{7}{24}h^2 M \end{aligned}$$

เราสามารถใช้ผลลัพธ์ข้างต้นในการหาระยะห่าง h ที่ทำให้ค่า error เท่ากับ ϵ ที่ต้องการได้

$$(b-a)\frac{7}{24}h^2 M \leq \epsilon$$

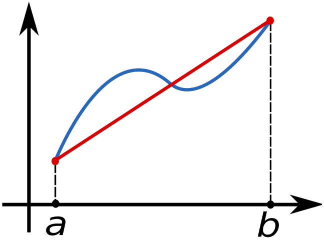
หรือ

$$h \leq \sqrt{\frac{24\epsilon}{7(b-a)M}}$$

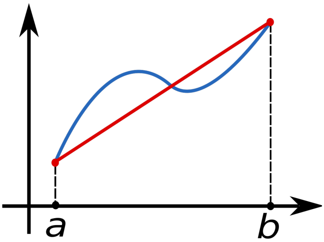
Trapezoid rule

Why?

- ความจริงแล้วเราสามารถมอง Midpoint method ได้ว่าเป็นวิธีที่ใช้พนุนามอย่างง่ายเชื่อมจุดปลายของส่วนย่อยของกราฟเข้าไว้ด้วยกัน
- พหุนามดังกล่าวมีค่าเท่ากันตลอด ซึ่งเราเรียกว่า constant polynomial (พหุนามกำลัง 0)
- เราสามารถทำให้การประมาณพื้นที่ในส่วนย่อยนั้นดีขึ้น หากเราใช้พนุนามกำลัง 1 แทนพหุนามกำลัง 0

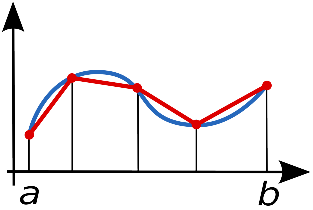


พื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมู



- พื้นที่สี่เหลี่ยม บวก ติ่งสามเหลี่ยม
- พื้นที่สี่เหลี่ยม $= f(a) \times h$
- พื้นที่ติ่งสามเหลี่ยม $\frac{1}{2} \times h * (f(b) - f(a))$
- ดังนั้นพื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมูคือ $\frac{f(b)-f(a)}{2} \times h$

Trapezoid rule



- การประมาณพื้นที่ใต้กราฟโดย trapezoid rule

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)$$

Approximation Error

- สามารถทำได้โดยการหา Taylor expansion ของค่าที่แท้จริงกับค่าประมาณโดย Trapezoid rule
- Local error

$$\left| \frac{1}{2} \int_a^b f(x)\, dx - \frac{f(b) - f(a)}{2}(b - a) \right| \leq \frac{5M}{12}(b - a)^3 \tag{14}$$

- Global error

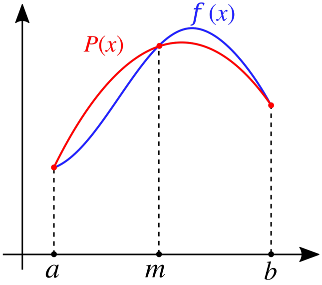
$$error_{global} \leq (b - a)\frac{5h^2}{12} M \tag{15}$$

- $M = \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$

Simpson's rule

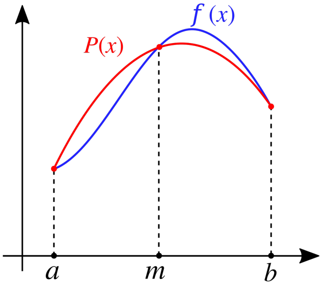
Why?

- Trapezoid rule ใช้พหุนามกำลัง 1 ในการประมาณรูปร่างของฟังก์ชัน
- เราอาจทำได้ดีกว่านี้หากเราเลือกใช้ พหุนามกำลังสอง



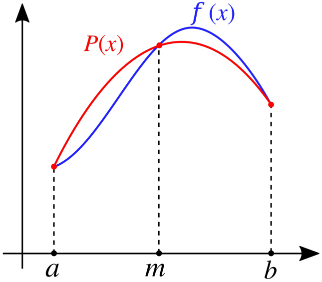
How ?

- เราสามารถมองการหาพหุนามกำลังสองที่เชื่อมจุดปลายของส่วนย่อยเข้าด้วยกันว่าเป็นปัญหาการทำ interpolation ได้
- สิ่งที่เราต้องทำคือการหา interpolant แล้วค่อย integrate interpolant ที่ได้
- หากยังพอจำได้ การจะหาพหุนามกำลังสอง เราต้องการข้อมูล 3 จุด



How ?

- เราจะเริ่มจากการหา Simpson integration บนช่วง $a = -1$, $m = 0$ และ $b = 1$
- จากนั้นเราจะใช้ผลลัพธ์ที่ได้ เพื่อสร้าง Simpson integration สำหรับช่วง $[a, b]$ ใดๆ



Interpolating three points

- ความจริงแล้วเราจะใช้การทำ interpolation แบบใดก็ได้ แต่ในที่นี้เราจะใช้ Lagrange interpolation.
- Lagrange interpolation ที่ interpolate f ณ จุด -1, 0 ,1 คือ

$$p_2(x) = f(-1)\frac{x(x-1)}{2} - f(0)(x+1)(x-1) + f(1)\frac{(x+1)x}{2} \tag{16}$$

- สามารถตรวจสอบดูได้ว่า $p_2(x)$ interpolate ข้อมูลจริง

Interpolating three points

- Integrating p_2

$$p_2(x) = f(-1)\frac{x(x-1)}{2} - f(0)(x+1)(x-1) + f(1)\frac{(x+1)x}{2} \tag{17}$$

- Integrating p_2

$$= \int_{-1}^{1} f(-1)\frac{x(x-1)}{2} - f(0)(x+1)(x-1) + f(1)\frac{(x+1)x}{2}\,dx \tag{18}$$

$$= f(-1)\int_{-1}^{1}\frac{(x^2-x)}{2}\,dx - f(0)\int_{-1}^{1} x^2 - 1\,dx + f(1)\int_{-1}^{1}\frac{(x^2+x)}{2}\,dx \tag{19}$$

$$= \frac{1}{3}\Big(f(-1) + 4f(0) + f(1)\Big) \tag{20}$$

Extending the result to [a,b] interval

- ตัวแปร x อยู่ในช่วง $[-1, 1]$ (integrate โดยใช้ Simpson's rule ที่สร้างไปตอนต้นได้)
- หากต้องการ integrate ฟังก์ชัน g ในช่วง $[a, b]$ ใดๆ เราสามารถสร้างตัวแปร y ที่สัมพันธ์กับตัวแปร x แต่มีค่าอยู่ในช่วง $[a, b]$ ได้ โดยกำหนดให้ $y = (b-a)\frac{x+1}{2} + a$
- การ integrate ฟังก์ชัน g ในช่วง $[a, b]$ ก็เทียบเท่ากับ

$$
\begin{aligned}
\int_a^b g(y)\,dy &= \int_{-1}^{1} g((b-a)\frac{x+1}{2} + a)\,dy \\
&= \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(x)\,dx
\end{aligned}
$$

- หมายเหตุ เราใช้ $dy = (b-a)dx/2$ และ $g((b-a)\frac{x+1}{2} + a) = f(x)$

Wait a minute

- เมื่อแทนค่าตัวแปรเรียบร้อย เราพบว่าการ integrate ฟังก์ชันในช่วง $[a, b]$ สามารถเปลี่ยนให้อยู่ในรูปการหา integral ในช่วง $[-1, 1]$ ซึ่งเราทราบวิธีหาอยู่แล้ว (page 31)

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx \frac{1}{3}\Big(f(-1) + 4f(0) + f(1)\Big) \quad \text{(จากสมการที่ 20)}$$
$$= \frac{1}{3}\Big(g(a) + 4g(\frac{a+b}{2}) + g(b)\Big)$$

So

- หากแทนค่าการหา integral ของช่วง $[-1, 1]$ ลงในนิพจน์เราจะได้การประมาณค่า integral ของฟังก์ชัน g ในช่วง $[a, b]$ ใดๆ

$$\int_a^b g(x)\,dx \approx \frac{(b-a)}{6}\Big(g(a) + 4g(\frac{a+b}{2}) + g(b)\Big)$$

Approximation Error

- Error is bounded by

$$error \leq \frac{49}{2880}(b-a)^5 \max_{x\in[a,b]} |g''''(x)|$$

- สามารถอ่านเพิ่มเติมวิธีการคำนวณ error ได้จากเอกสาร `https://www.uio.no/studier/emner/matnat/math/MAT-INF1100/h08/kompendiet/diffint.pdf`

References

- Introduction to numerical analysis by Doron Levy
- Differentiation and Integration https://www.uio.no/studier/emner/matnat/math/MAT-INF1100/h08/kompendiet/diffint.pdf
- http://www.mathcs.emory.edu/~cheung/Courses/170/Syllabus/07/rectangle-method.html