

CS381: Numerical Computation & Softwares

Numerical Integration

Jakramate Bootkrajang

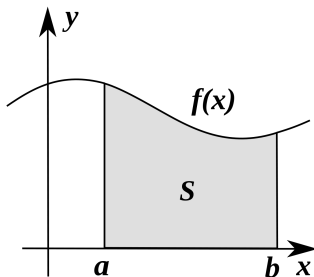
Department of Computer Science
Chiang Mai University

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

- *Galileo* -

Introduction

- ในบทนี้เราจะศึกษาการทำ numerical integration
- กล่าวโดยภาพรวม การทำ integration คือการหา integral (พื้นที่ใต้กราฟ ปริมาตร เป็นต้น)



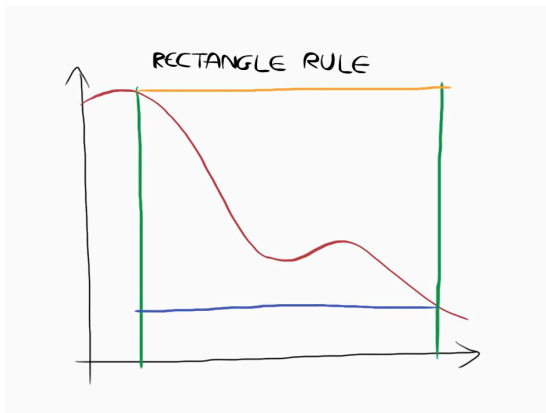
- Numerical integration ศึกษาการประมาณค่าของ integral ให้ใกล้เคียงความเป็นจริงที่สุด

Let's think about it

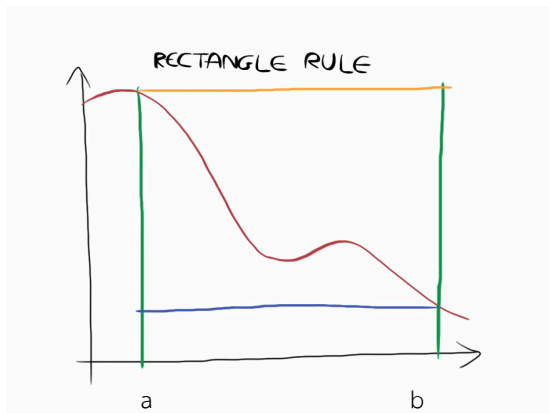
ให้นักศึกษาจับกลุ่มกัน 3-4 คน เพื่อออกแบบวิธีการที่จะสามารถนำมาใช้ในการประมาณพื้นที่ใต้กราฟของฟังก์ชัน 1 ตัวแปรได้

Integration using rectangle (1/4)

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

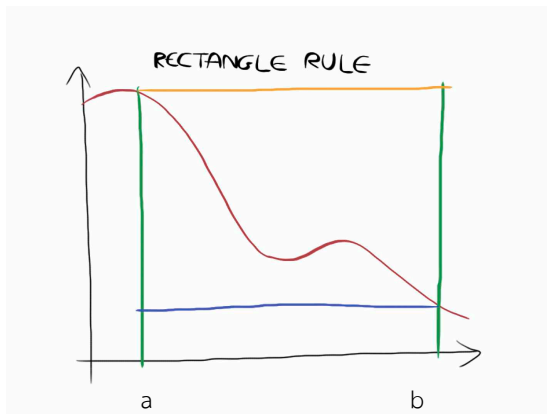


Integration using rectangle (2/4)



- พื้นที่สี่เหลี่ยมมีค่าเท่ากับ กว้าง \times สูง
- สี่เหลี่ยมนี้กว้างเท่าไร สูงเท่าไร

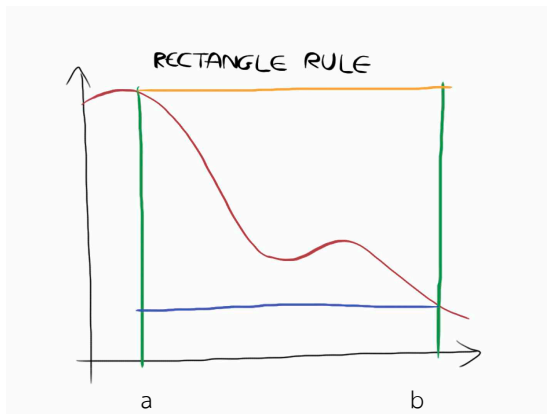
Integration using rectangle (3/4)



- หากเราใช้ความสูงเท่ากับเส้นสีส้ม เราจะได้ค่าประมาณคือ

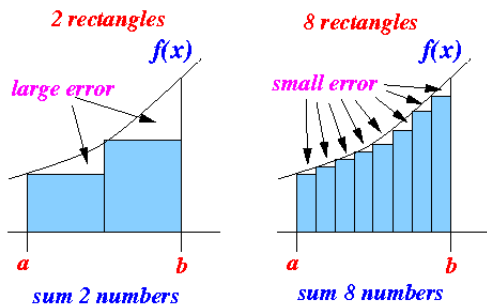
$$\int_a^b f(x) dx \approx \max f(x) \cdot (b - a), x \in [a, b] \rightarrow f(a) \cdot (b - a)$$

Integration using rectangle (4/4)



- 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 $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{n+1}$ เราสามารถแสดง พื้นที่ประมาณในเชิงคณิตศาสตร์ได้ว่า (เมื่อใช้ค่า min)

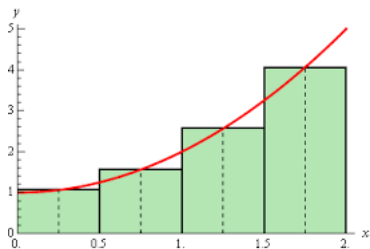
$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \min_{x \in [x_i, x_{i+1}]} f(x) (x_{i+1} - x_i)$$

- 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
- เราอาจใช้ค่าของฟังก์ชัน ณ จุดกลางระหว่าง x_i และ x_{i+1} มาใช้แทนความสูงของสี่เหลี่ยมก็ได้

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

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}

- เรายากทราบว่าในทางทฤษฎีแล้วการประมาณ integral โดยใช้ midpoint method จะมีความแม่นยำเพียงใด
- การทำ 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 of midpoint method

- สิ่งที่เราต้องการหาคือ ผลต่างของ ค่า integral กับค่าประมาณ

$$error = \left| \int_a^b f(x) dx - f(c)(b - a) \right|$$

where $c = \frac{a+b}{2}$

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

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

- Integrate taylor expansion ข้างบนจะได้ว่า

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

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

- Eq.3 คือค่า integral ที่ควรจะเป็น

Taylor expansion (again)

- Taylor expansion ของ $f(c)$ คือ

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

- นำ $(b - a)$ คูณทั้งซ้ายและขวา

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

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

- Eq.6 คือค่า integral ของวิธี midpoint method

So the error is

- 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

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

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

$$\left| \frac{1}{2} \int_a^b (x-a)^2 f''(\xi_1) dx - \frac{(b-a)^3}{8} f''(\xi_2) \right| \quad (7)$$

$$\leq \frac{1}{2} \int_a^b (x-a)^2 M dx + \frac{(b-a)^3}{8} M \quad (8)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{M}{6} (b-a)^3 + \frac{M}{8} (b-a)^3 \\ &= \frac{7M}{24} (b-a)^3 \end{aligned} \quad (9)$$

- Important: เราสามารถลด error โดยการลดระยะห่างระหว่าง b กับ a !!

Error ทั้งหมดก็คือผลรวมของ error ของแต่ละช่วง

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

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

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

$$= \frac{7}{24} h^3 NM \quad (13)$$

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

Finding a good h

เราสามารถเขียน Eq.(13) ใหม่โดยสังเกตว่า $h = \frac{(b-a)}{N}$, $hN = (b-a)$

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

เราสามารถใช้ผลลัพธ์ข้างต้นในการหาระยะห่าง h ที่ทำให้ค่า error เท่ากับ ϵ ที่ต้องการได้

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

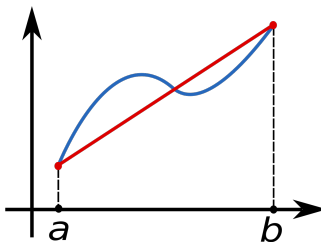
หรือ

$$h \leq \sqrt{\frac{23\epsilon}{7(b-a)M}}$$

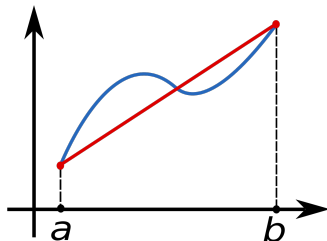
Trapezoid rule

Why?

- ความจริงแล้วเราสามารถมอง Midpoint method ได้ว่าเป็นวิธีที่ใช้พหุนามอย่างง่ายเชื่อมจุดปลายของส่วนย่อยของกราฟเข้าไว้ด้วยกัน
- พหุนามดังกล่าวมีค่าเท่ากันตลอด ซึ่งเราเรียกว่า constant polynomial (พหุนามกำลัง 0)
- เราสามารถทำให้การประมาณพื้นที่ในส่วนย่อยนั้นดีขึ้น หากเราใช้พหุนามกำลัง 1 แทนพหุนามกำลัง 0

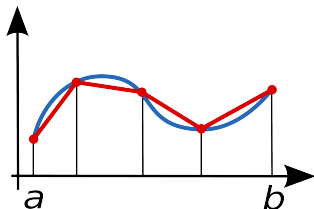


พื้นที่สี่เหลี่ยมคางหมู



- พื้นที่สี่เหลี่ยม บวก ตั้งสามเหลี่ยม
- พื้นที่สี่เหลี่ยม = $f(a) \times h$
- พื้นที่ตั้งสามเหลี่ยม $\frac{1}{2} \times h * (f(b) - f(a))$
- 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

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

- Global error

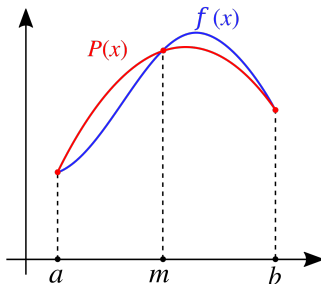
$$error_{global} \leq (b - a) \frac{5h^2}{12} M \quad (15)$$

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

Simpson's rule

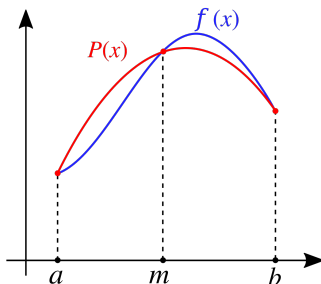
Why?

- Trapezoid rule ใช้พหุนามกำลัง 1 ในการประมาณรูปร่างของฟังก์ชัน
- เราอาจทำได้ดีกว่านี้หากเราเลือกใช้ พหุนามกำลังสอง



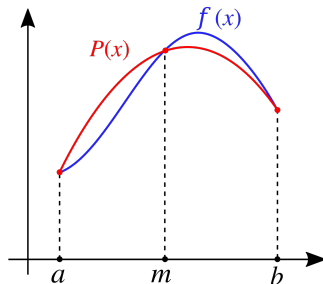
How ?

- 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

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

Integrating three points interpolant

- Integrating p_2

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

- Integrating p_2

$$\begin{aligned} &= \int_{-1}^1 f(-1)\frac{x(x-1)}{2} - f(0)(x+1)(x-1) + f(1)\frac{(x+1)x}{2} dx \\ &= f(-1) \int_{-1}^1 \frac{(x^2 - x)}{2} dx - f(0) \int_{-1}^1 x^2 - 1 dx + f(1) \int_{-1}^1 \frac{(x^2 + x)}{2} dx \\ &= \frac{1}{3} (f(-1) + 4f(0) + f(1)) \end{aligned}$$

Extending the result to $[a,b]$

- สมมุติว่ามีตัวแปร y ซึ่งอยู่ในช่วง $[-1, 1]$ (ช่วงที่เราสามารถ integrate โดยใช้ Simpson's rule)
- เราสามารถสร้างตัวแปร x ที่สัมพันธ์กับตัวแปร y แต่มีค่าอยู่ในช่วง $[a, b]$ ได้ โดยกำหนดให้ $x = (b - a)\frac{y+1}{2} + a$ และได้ว่า $dx = (b - a)dy/2$
- การ integrate ฟังก์ชันจาก $[a, b]$ ก็เทียบเท่ากับ

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

- เมื่อแทนค่าตัวแปรเรียบร้อยแล้ว เราพบว่า การ integrate ฟังก์ชันในช่วง $[a, b]$ สามารถเปลี่ยนให้อยู่ในรูปการหา integral ในช่วง $[-1, 1]$ ซึ่งเราทราบวิธีหาอยู่แล้ว (page 31)

$$\begin{aligned}\int_{-1}^1 h(y) dy &\approx \frac{1}{3} \left(h(-1) + 4h(0) + h(1) \right) \\ &= \frac{1}{3} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)\end{aligned}$$

หมายเหตุ $h(y) = f\left((b-a)\frac{y+1}{2} + a\right)$

So, the Simpson's rule

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

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

- วิธีการประมาณ integral ด้านบนก็คือ กฎของ Simpson นั่นเอง

- ความคลาดเคลื่อนที่เกิดจากการประมาณ integral ด้วย Simpson's rule คือ

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

- สามารถอ่านเพิ่มเติมวิธีการคำนวณ error ได้จากเอกสาร

<https://www.uio.no/studier/emner/matnat/math/MAT-INF1100/h08/kompendiet/diffint.pdf>

- 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>