

Luku 5

Numeerinen integrointi

5.1 Yksiulotteinen tapaus

Olkoon f jokin funktio jonka integraali halutaan laskea jollain välillä $[a, b]$. Jos löydetään jokin funktio F siten, että $F' = f$, niin differentiaalilaskennan peruslauseen mukaan

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(x)dx$$

Ehkäpä selvyiden vuoksi voisi sanoa, että F on funktion f *antiderivaatta* sillä funktion f *integraali* $\int_a^b f(x)dx$ on reaaliluku. Antiderivaatan etsiminen kuuluu symbolisen laskennan piiriin, ja integraalin laskeminen taas on numeerista analyysiä.

Joka tapauksessa antiderivaatta voidaan löytää suhteellisen harvoin: monilla varsin yksinkertaisillakaan funktioilla ei ole antiderivaattaa, kuten $\exp(-x^2)$, $\sin(x)/x$ jne. Moniulotteisissa integroinnissa jopa antiderivaatan käsite on tavallaan epämieliekäs: differentiaalilaskennan peruslause voidaan tietyllä tavalla yleistää moniulotteiseen tapaukseen¹, mutta se ei auta integraalin laskennassa.

Miten sitten voitaisiin laskea arvio integraalille? Seuraavassa oletetaan, että integraali on sinänsä hyvin määritelty. Esimerkiksi jos funktio on jatkuva niin se on silloin Riemann-integroituva. Myös paljon laajemmalle funktiojoukolle voidaan määritellä integraali, mutta ei nyt puututa siihen. Näitä asioita käsitellään kurssilla MITTA- JA INTEGROINTITEORIA.

5.1.1 Bernstein ja Newton-Cotes

Sopivalla muuttujan vaihdolla voidaan aina vaihtaa integroitavan funktion määrittelyalue väliksi $[0, 1]$. Jos halutaan integroida välillä $[a, b]$, niin tämä voidaan helposti palauttaa perustapaukseen kuvauksen $\varphi(x) = a + (b - a)x$ avulla. Tällöin

$$\int_a^b f(x)dx = (b - a) \int_0^1 f(\varphi(x))dx$$

¹Tämä yleistys on *divergenssilause*.

Oletetaan siis heti merkintöjen yksinkertaistamiseksi, että integraali halutaan laskea välillä $I = [0, 1]$. Olkoon siis annettu jokin $f \in C(I)$ ja haluttaisiin laskea $\int_0^1 f(x)dx$.

Palataan funktion approksimointiin. Weierstrassin lauseen 4.1 perusteella jatkuvaa funktiota voidaan approksimoida mielivaltaisen tarkasti polynomeilla. Eräs idea on siis muodostaa funktiolle f sopiva polynomiapproksimaatio ja sitten integroida kyseinen polynomi. Olkoon $f_n \in \mathbb{P}_n$ jokin tällainen polynomiapproksimaatio. Tällöin

$$\left| \int_0^1 f(x)dx - \int_0^1 f_n(x)dx \right| \leq \int_0^1 |f(x) - f_n(x)|dx \leq \int_0^1 \|f - f_n\|_\infty dx = \|f - f_n\|_\infty$$

Siis jos $\|f - f_n\|_\infty$ on pieni, niin virhe integraalissakin on pieni. Weierstrassin lause todistettiin näyttämällä, että jos muodostetaan Bernsteinin polynomien avulla approksimaatio

$$b_n(x) = \sum_{k=0}^n f(k/n) B_k^n(x)$$

niin $\|f - b_n\|_\infty \leq \|f''\|_\infty / 8n$. Mutta nythän Lemman A.3 mukaan

$$\int_0^1 b_n(x)dx = \sum_{k=0}^n f(k/n) \int_0^1 B_k^n(x)dx = \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n f(k/n)$$

Merkitään $x_k = kh$ missä $h = 1/n$. Nyt saadaankin sitten

$$\left| \int_0^1 f(x)dx - \frac{1}{n+1} \sum_{k=0}^n f(x_k) \right| \leq \frac{\|f''\|_\infty}{8n} = \mathcal{O}(h)$$

Toisin sanoen virhe pienenee kuten $1/n$ kun $n \rightarrow \infty$.

Esimerkki 5.1. Olkoon $f(x) = \sin(x) + \cos(x)$. Olkoon virhe $\mathcal{E}_n$. Saadaan seuraava taulukko

n	$\mathcal{E}_n$	$\mathcal{E}_n/\mathcal{E}_{2n}$
4	$2.748 \cdot 10^{-2}$	1.997
8	$1.376 \cdot 10^{-2}$	1.998
16	$6.886 \cdot 10^{-3}$	1.999
32	$3.445 \cdot 10^{-3}$	1.999
64	$1.723 \cdot 10^{-3}$	

Koska $\|f''\|_\infty \leq 2$, niin saadaan yksinkertainen arvio $\mathcal{E}_n \leq 1/4n$. Tämä on vain noin 2 kertaa suurempi kuin todellinen virhe, ja joka tapauksessa se antaa oikean kuvan suppenemisesta $n:n$ funktiona. ★

Bernsteinin polynomeihin perustuva menetelmä siis suppenee kun n kasvaa, mutta suppeneminen on varsin hidasta. Kuten jo aiemmin todettiin, niin Bernsteinin approksimaatiot b_n suppenevat hitaasti kohti f :ä, joten on varsin luonnollista, että integraalin suppeneminenkin on hidasta.

Mutta jospa sitten interpoloitaisiin Lagrangen polynomien avulla?² Tämä voisi johtaa hyvään lopputulokseen koska jos f_n on f :n interpoloiva polynomi niin tyypillisesti $f - f_n$ vaihtaa merkkiä interpolointipisteissä. Integrointivirheet voisivat siis osittain kumoutua, joten voisi olettaa, että³

$$\left| \int_0^1 f(x)dx - \int_0^1 f_n(x)dx \right| = \left| \int_0^1 (f(x) - f_n(x))dx \right| << \int_0^1 |f(x) - f_n(x)|dx$$

Interpoloidaan tasavälisesti ja lasketaan 1., 2. ja 4. asteen interpoloivat polynomit. Lagrangen polynomien avulla saadaan

$$\begin{aligned} \mathbf{la}_1 &= f(0)\mathcal{L}_0^1 + f(1)\mathcal{L}_1^1 = f(0)(1-x) + f(1)x \\ \mathbf{la}_2 &= f(0)\mathcal{L}_0^2 + f(1/2)\mathcal{L}_1^2 + f(1)\mathcal{L}_2^2 \\ &= f(0)(x-1)(2x-1) + 4f(1/2)x(1-x) + f(1)x(2x-1) \\ \mathbf{la}_4 &= f(0)\mathcal{L}_0^4 + f(1/4)\mathcal{L}_1^4 + f(1/2)\mathcal{L}_2^4 + f(3/4)\mathcal{L}_3^4 + f(1)\mathcal{L}_4^4 \end{aligned}$$

Integroimalla saadaan

$$\begin{aligned} \int_0^1 \mathbf{la}_1 dx &= \frac{1}{2} (f(0) + f(1)) \\ \int_0^1 \mathbf{la}_2 dx &= \frac{1}{6} (f(0) + 4f(1/2) + f(1)) \\ \int_0^1 \mathbf{la}_4 dx &= \frac{1}{90} (7f(0) + 32f(1/4) + 12f(1/2) + 32f(3/4) + 7f(1)) \end{aligned}$$

Esimerkki 5.2. Olkoon $f(x) = \sin(x) + \cos(x)$. Tällöin virheelle saadaan

$$\mathcal{E}_n = \left| \int_0^1 (f - \mathbf{la}_n) dx \right| \approx \begin{cases} 0.110 & , n = 1 \\ 4.66 \cdot 10^{-4} & , n = 2 \\ 6.95 \cdot 10^{-7} & , n = 4 \end{cases}$$

Tapauksessa $n = 4$ approksimaatio on jo varsin hyvä. Lauseessa 4.2 saatiin interpolointivirheelle arvio

$$\|f - \mathbf{la}_n\|_\infty \leq \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty h^{n+1}}{4(n+1)}$$

missä $h = 1/n$. Selvästi nyt $\|f^{(n+1)}\|_\infty \leq 2$ kaikilla n , joten

$$\int_0^1 |f - \mathbf{la}_n| dx \leq \begin{cases} 0.25 & , n = 1 \\ 1/48 \approx 0.021 & , n = 2 \\ 1/10240 \approx 9.8 \cdot 10^{-5} & , n = 4 \end{cases}$$

Nähdään, että virhearvio on turhan pessimistinen eikä anna virheelle oikeaa suuruusluokkaa paitsi tapauksessa $n = 1$. Siis virhe todella merkittävästi pienenee merkkivaihtojen takia. ★

²Legendren polynomeista ei ole mitään hyötyä integraalin laskemisessa. Miksi?

³Merkinnän $<<$ voi lukea: on huomattavasti pienempi kuin.

Nähdään, että sekä Bernsteinin polynomeja että interpoloivia polynomeja käytettäessä päädyttiin seuraavanlaiseen approksimaatioon: valitaan jotkin pisteet $0 \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq 1$ ja vastaavat painokertoimet c_j siten, että

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \sum_{j=0}^n c_j f(x_j) \quad (5.1)$$

Tästä saadaankin

Ongelma 5.1. Miten parametrit c_j ja x_j pitäisi valita, että virhe olisi mahdollisimman pieni? *

Lähestytään tätä ongelmaa epäsuorasti. Kaikille yllä tarkastelluille integrointimenetelmille pätee, että saadut approksimaatiot integroivat tarkasti matala-asteisia polynomeja. Tästä saadaankin tärkeä käsite.

Määritelmä 5.1. *Integrointimenetelmän kertaluku on $n + 1$, jos*

$$\int_0^1 f(x) dx = \sum_{j=0}^n c_j f(x_j) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_n$$

Äsken saatujen menetelmien tapauksessa

Lemma 5.1. *Esimerkin 5.2 menetelmien kertaluvut ovat 2, 4 ja 6.*

Todistus. Pitää siis osoittaa, että

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x) dx &= \frac{1}{2} (f(0) + f(1)) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_1 \\ \int_0^1 f(x) dx &= \frac{1}{6} (f(0) + 4f(1/2) + f(1)) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_3 \\ \int_0^1 f(x) dx &= \frac{1}{90} (7f(0) + 32f(1/4) + 12f(1/2) + 32f(3/4) + 7f(1)) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_5 \end{aligned}$$

Luonnollisesti riittää testata, että saadaan tarkka tulos kantafunktioilla $\{1, x, \dots, x^n\}$. Suoraviivainen tarkistus jätetään harjoitustehtäväksi. ♦

Voisi kuvitella, että jos integroidaan tarkasti polynomeja niin tämä olisi hyvä ominaisuus. Voidaankin siis kysyä

Ongelma 5.2. Miten parametrit c_j ja x_j pitäisi valita, että kertaluku on mahdollisimman iso? Onko olemassa menetelmiä joilla on mielivaltaisen iso kertaluku? *

On luonnollista olettaa, että kun lisätään pisteitten x_j määrää, niin voidaan valita c_j ”sopivasti” jotta kertaluku kasvaa. Näin todella tapahtuu.

Lemma 5.2. *Olkoon annettu jotkin luvut $0 \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq 1$. Tällöin on olemassa c_j siten, että saadaan kertalukua $n + 1$ oleva menetelmä.*

Todistus. Pitäisi siis valita c_j siten, että

$$\int_0^1 f(x)dx = \sum_{j=0}^n c_j f(x_j) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_n$$

Koska $\{1, x, \dots, x^n\}$ on kanta, niin saadaan yhtälöt

$$\int_0^1 x^\ell dx = 1/(\ell + 1) = \sum_{j=0}^n c_j x_j^\ell, \quad 0 \leq \ell \leq n$$

Olkoon $c = (c_0, c_1, \dots, c_n)$ ja $b = (1, 1/2, \dots, 1/(n+1))$. Muodostetaan Vandermonden matriisi (A.4), jolloin saadaan yhtälöryhmä $V^T c = b$. Lemman A.6 mukaan $\det(V) \neq 0$, joten c voidaan ratkaista. $\diamond$

Silloin kun pisteet x_j ovat tasavälein, niin näin saatuja kaavoja sanotaan *Newton-Cotes menetelmiksi*. Esimerkissä 5.2 muodostettiin siis kertalukua 2, 4 ja 6 olevat Newton-Cotes menetelmät.

Valitettavasti nämä menetelmät ovat hyödyllisiä vain suhteellisen pienillä n :n arvoilla. Kun $n > 7$, niin osa kertoimista c_j on negatiivisia. Tämä on numeerisesti epästabiilia.

Esimerkki 5.3. Olkoon $f(x) = \exp(-100(x-0.4)^2)$. Selvästi $f(x) \geq 0$ joten integraalikin on varmasti positiivinen ja itse asiassa $\int_0^1 f(x)dx \approx 0.177$. Newton-Cotes arvolla $n = 30$ antaa kuitenkin MAPLEN oletustarkkuudella laskien ≈ -2.9 . $\star$

Kun lasketaan kertoimia eri n :n arvoilla niin huomataan, että maksimiarvot kasvavat erittäin nopeasti n :n funktiona.

$$\begin{aligned} n = 20 & \Rightarrow \max_j |c_j| \approx 32 \\ n = 30 & \Rightarrow \max_j |c_j| \approx 23000 \\ n = 40 & \Rightarrow \max_j |c_j| \approx 7 \cdot 10^8 \end{aligned}$$

Kun kertoimet ovat osaksi negatiivisia, niin kertaluvun ilmoittama tarkkuus perustuu oleellisesti siihen, että virheet kumoutuu kun lasketaan erotus kahdesta suuresta luvusta. Liukuluvuilla laskiessa tästä aiheutuu aina numeerisia ongelmia. Tätä epästabiiliisuutta voidaan pitää eräänä Rungen ilmiön (katso esimerkki 4.6) esiintymismuotona. Interpolointipolynomit, jotka ovat menetelmän pohjana, eivät suppenekaakaan kohti haluttua funktiota, minkä takia kertoimet c_j ”käyttäytyvät oudosti”.

Määritelmä 5.2. *Integrointimenetelmä*

$$\mathcal{I}_n(f) = \sum_{k=0}^n c_k f(x_k)$$

on stabiili, jos kertaluku on vähintään yksi ja $c_k > 0$ kaikilla k .

Huomaa, että stabiileilla menetelmillä itse asiassa $0 < c_k < 1$ kaikilla k koska kertalukuehdosta seuraa, että $\sum_k c_k = 1$. Erityisesti tästä kertoimien positiivisuudesta seuraa, että

$$f \geq 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{k=0}^n c_k f(x_k) \geq 0$$

joten edellisen esimerkin tyyppisiä ongelmia ei voi esiintyä.

Tavoitteena on siis löytää stabiileja menetelmiä joille virhe menee nolnaan kun $n \rightarrow \infty$. Koska Newton-Cotes kaavat ovat stabiileja vain kun $n \leq 7$, niin pitää yrittää parantaa tarkkuutta muulla tavalla. Tähän on 2 erilaista tapaa, jotka molemmat ovat omalla tavallaan hyödyllisiä. Ensimmäinen tapa on välttää epästabiilisuutta jakamalla tarkasteluväli pienempiin osiin (kuten splinien tapauksessa) ja soveltamalla Newton-Cotes kaavoja jokaisella osavälillä erikseen. Toinen tapa on pyrkiä valitsemaan pisteet x_j jotenkin ”optimaalisesti” mikä (toivottavasti) johtaisi stabiileihin menetelmiin. Tarkastellaan ensin jälkimmäistä tapausta.

5.1.2 Gaussin menetelmät

Lemman 5.2 mukaan saadaan kertalukua n oleva menetelmä valittiinpa pisteet x_j miten tahansa. Nyt voisi kuvitella, että jos myös pisteet x_j valitaan jotenkin erityisesti niin kertalukua voitaisiin kenties nostaa vaikka pisteitten lukumäärä ei kasvaisikaan. Luonnollisesti tästä ei automaattisesti seuraa, että näin saadut menetelmät olisivat sen stabiilimpia kuin Newton-Cotes menetelmäkään.

Esimerkki 5.4. Kahden pisteen tapauksessa pyritään siis valitsemaan x_1, x_2, c_1 ja c_2 siten, että

$$\int_0^1 f(x) dx = c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_k$$

missä k on mahdollisimman iso. Koska nyt on neljä vapaata parametria, niin voisi kuvitella, että ne voidaan valita siten, että neljä ehtoa toteutuu. Tämä johtaa yhtälöihin

$$\begin{aligned} \int_0^1 1 dx &= 1 = c_1 + c_2 \\ \int_0^1 x dx &= 1/2 = c_1 x_1 + c_2 x_2 \\ \int_0^1 x^2 dx &= 1/3 = c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2 \\ \int_0^1 x^3 dx &= 1/4 = c_1 x_1^3 + c_2 x_2^3 \end{aligned}$$

Koska kyseessä on polynomisysteemi, niin systeemillä on ainakin kompleksisia ratkaisuja, mutta reaalisen ratkaisun olemassaolo ei ole mitenkään itsestään selvää. Lisäksi pitäisi päteä $0 \leq x_j \leq 1$, mikä sekään ei vaikuta aivan selvältä...

Yllä saatua yhtälöryhmää voi kuitenkin yrittää sieventää symmetria-argumentilla. Koska on vain kaksi pistettä joissa f lasketaan, niin tuntuisi luonnolliselta että niillä

molemmilla olisi yhtä suuri ”painoarvo”. Siis ”arvataan”, että $c_1 = c_2 = 1/2$, jolloin toisesta yhtälöstä saadaan $x_1 + x_2 = 1$. Sijoittamalla edelleen nähdään, että $6x_1^2 - 6x_1 + 1 = 0$ mistä edelleen

$$x_{\pm} = 1/2 \pm \frac{1}{2\sqrt{3}}$$

Pisteet $x_{\pm}$ kuuluvat välille $[0, 1]$ joten kahdella pisteellä saatiin 4. kertaluvun menetelmä.

★

Huomaa, että tämä lähestymistapa johtaa aina epälineaariseen polynomisysteemiin. Sen sijaan niin kuin on nähty jos pisteet x_j kiinnitetään niin tällöin saadaan lineaarinen systeemi kertoimille c_j .

Yllä saatu polynomi $L_2 = 6x^2 - 6x + 1$ jonka nollakohdat antavat halutut pisteet x_j on toisen asteen Legendren polynomi (katso Määritelmä A.3). Korkeamman asteen Legendren polynomit antavat korkeamman kertaluvun menetelmiä.

Lause 5.1. Olkoon $0 < x_1 < \dots < x_n < 1$ Legendren polynomin L_n nollakohdat. Tällöin on olemassa c_j siten, että

$$\int_0^1 f(x)dx = \sum_{j=1}^n c_j f(x_j) \quad \text{kaikille } f \in \mathbb{P}_{2n-1}$$

Todistus. Lemman A.1 mukaan L_n :llä on n nollakohtaa välillä $(0, 1)$. Olkoon sitten $f \in \mathbb{P}_{2n-1}$ mielivaltainen. Tällöin on olemassa yksikäsitteiset $q, r \in \mathbb{P}_{n-1}$ siten, että $f = qL_n + r$. Siispä

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 q(x)L_n(x)dx + \int_0^1 r(x)dx = \int_0^1 r(x)dx$$

Toisaalta

$$\sum_{j=1}^n c_j f(x_j) = \sum_{j=1}^n c_j (q(x_j)L_n(x_j) + r(x_j)) = \sum_{j=1}^n c_j r(x_j)$$

Valitaan nyt c_j kuten Lemmassa 5.2. Tällöin

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 r(x)dx = \sum_{j=1}^n c_j r(x_j) = \sum_{j=1}^n c_j f(x_j)$$

✧

Valitaan siis kertoimet c_k kuten edellä ja olkoon x_k Legendren polynomin nollakohdat. Näin saatuja menetelmiä

$$\mathcal{I}_{\text{ga},n}(f) = \sum_{k=1}^n c_k f(x_k)$$

kutsutaan *Gaussin menetelmiksi*. Nämä ovat hyödyllisiä suhteellisen isoillakin n :n arvoilla.

Lemma 5.3. *Gaussin menetelmät ovat stabiileja.*

Todistus. Pitää siis osoittaa, että $c_k > 0$ kaikilla k . Olkoon $p_k = \prod_{j \neq k} (x - x_j)^2$. Tällöin p_k on astetta $2n - 2$ joten

$$0 < \int_0^1 p_k(x) dx = \sum_{j=1}^n c_j p_k(x_j) = c_k p_k(x_k)$$

✧

Toisin sanoen Gaussin kaavoilla ei voi tapahtua merkitsevien numeroitten katastrofaalista kumoutumista kuten Newton-Cotes menetelmissä isoilla $n:n$ arvoilla.

Esimerkki 5.5. Entäpä 4 pisteen tapaus. Olkoon $x_1 < x_2 < x_3 < x_4$ Legendren polynomin L_4 nollakohdat. Nämä pystytään vielä eksplisiittisesti laskemaan. Symmetriasyyistä voisi jälleen arvella, että $x_1 + x_4 = 1$ ja $x_2 + x_3 = 1$. Näin onkin:

$$x_{1,4} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{70} \sqrt{525 + 70\sqrt{30}} \quad \text{ja} \quad x_{2,3} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{70} \sqrt{525 - 70\sqrt{30}}$$

Tämän jälkeen pitäisi laskea kertoimet c_j . Symmetrian perusteella arvataan, että $c_1 = c_4$ ja $c_2 = c_3$. Tästä saadaan

$$\begin{aligned} \int_0^1 1 \, dx &= 1 = c_1 + c_2 + c_3 + c_4 = 2c_1 + 2c_2 \\ \int_0^1 x \, dx &= 1/2 = c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + c_4 x_4 = c_1 + c_2 \\ \int_0^1 x^2 \, dx &= 1/3 = c_1 x_1^2 + c_2 x_2^2 + c_3 x_3^2 + c_4 x_4^2 = c_1(x_1^2 + x_4^2) + c_2(x_2^2 + x_3^2) \\ \int_0^1 x^3 \, dx &= 1/4 = c_1 x_1^3 + c_2 x_2^3 + c_3 x_3^3 + c_4 x_4^3 = c_1(x_1^3 + x_4^3) + c_2(x_2^3 + x_3^3) \end{aligned}$$

Kaksi ensimmäistä yhtälöä on sama. Lopuista yhtälöistä saadaan

$$c_{1,4} = \frac{1}{4} - \frac{1}{72} \sqrt{30} \quad \text{ja} \quad c_{2,3} = \frac{1}{4} + \frac{1}{72} \sqrt{30}$$

★

Kuten edellisestä esimerkistä nähdään niin käsin laskien on erittäin työlästä laskea kertoimia ja määrittää Legendren polynomien nollakohtia. Isoilla $n:n$ arvoilla nollakohdat ja vastaavat kertoimet pitää laskea numeerisesti. Tämän takia ennen tietokoneaikaa Gaussin menetelmiä ei juurikaan käytetty.

5.1.3 Integroinnin jakaminen osaväleihin

Newton-Cotes kaavat isoilla $n:n$ arvoilla olivat siis epästabiileja. Toimitaan siis kuten splinien yhteydessä: jaetaan integroimisväli osiin ja sovelletaan Newton-Cotes kaavoja

jokaisella osavälillä erikseen. Katsotaan mihin tämä johtaa esimerkin 5.2 menetelmien tapauksessa. Valitaan siis jokin $h = 1/n$ ja olkoon $x_k = kh$, $0 \leq k \leq n$.

Tällöin siis lineaarinen interpolointi antaa välillä $[0, h]$

$$\int_0^h f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(0) + f(h))$$

Soveltamalla samaa ideaa osäväleillä $[kh, (k+1)h]$ saadaan

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(0) + 2f(h) + 2f(2h) + \cdots + 2f(1-h) + f(1)) = \mathcal{I}_{\text{tr},h}(f) \quad (5.2)$$

Samoin lähtien liikkeelle toisen asteen interpoloivasta polynomista saadaan ensin

$$\int_0^{2h} f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f(0) + 4f(h) + f(2h))$$

Soveltamalla taas samaa ideaa osäväleillä $[2jh, (2j+2)h]$ ja valitsemalla jälleen $h = 1/n$ saadaan

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f(0) + 4f(h) + 2f(2h) + \cdots + 4f(1-h) + f(1)) = \mathcal{I}_{\text{si},h}(f) \quad (5.3)$$

Huomaa, että tässä n :n täytyy olla parillinen.

Määritelmä 5.3. *Yhtälössä 5.2 määriteltyä menetelmää $\mathcal{I}_{\text{tr},h}(f)$ sanotaan trapetsimenetelmäksi ja yhtälössä 5.3 määriteltyä menetelmää $\mathcal{I}_{\text{si},h}(f)$ sanotaan Simpsonin menetelmäksi.*

Selvästi sekä trapetsimenetelmä että Simpsonin menetelmä ovat stabiileja.

5.2 Virhearvio

Edellä jo saatiin Bernsteinin menetelmälle virhearvio suoraan Weierstrassin Lauseen 4.1 avulla. Interpoloiville polynomeille samantyyppinen lähestymistapa johtaa liian pessimistiseen arvioon koska approksimaatiovirhe ei ota huomioon merkkivaihteluista johtuvaa virheitten kumoutumista. Trapetsimenetelmän, Simpsonin menetelmän sekä Gaussin menetelmien tapauksessa pitää edetä toisin jotta saataisiin realistinen arvio. Huomaa, että edellä määritelty kertaluku antaa vain algebrallisen kriteerin sille mitkä voisivat olla hyviä integrointimenetelmiä, mutta sehän ei suoraan johda varsinaiseen virhearvioon.

Analysoidaan seuraavassa tarkemmin trapetsimenetelmän tapaus. Muitten menetelmien arvioissa käytetään samantyyppisiä ideoita mutta tekniset yksityiskohdat ovat monimutkaisempia. Olkoon f sileä funktio ja asetetaan

$$M_n = \|f^{(n)}\|_\infty = \max_{0 \leq x \leq 1} |f^{(n)}(x)|$$

Trapetsimenetelmän virhe on

$$\mathcal{E}_{\text{tr}}(h) = \int_0^1 f(x)dx - \mathcal{I}_{\text{tr},h}(f)$$

Lemma 5.4.

$$|\mathcal{E}_{\text{tr}}(h)| \leq \frac{M_2}{12} h^2 = \mathcal{O}(h^2)$$

Todistus. Katsotaan ensin yhden osavälin virhe. Olkoon

$$\varepsilon_k(h) = \int_{(k-1)h}^{kh} f(x)dx - \frac{h}{2}(f((k-1)h) + f(kh))$$

jolloin siis $\mathcal{E}_{\text{tr}} = \sum_k \varepsilon_k$. Taylorin lauseen A.1 mukaan

$$f(x) = f(0) + f'(0)x + \int_0^x f''(s)(x-s)ds$$

Siispä

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \int_0^h \left(f(0) + f'(0)x + \int_0^x f''(s)(x-s)ds \right) dx - \frac{h}{2}(2f(0) + f'(0)h + \int_0^h f''(s)(h-s)ds) \\ &= \int_0^h \int_0^x f''(s)(x-s)dsdx - \frac{h}{2} \int_0^h f''(s)(h-s)ds \\ &= \int_0^h \int_x^h f''(s)(x-s)dsdx - \frac{h}{2} \int_0^h f''(s)(h-s)ds = \frac{1}{2} \int_0^h f''(s)(s^2 - hs)ds \end{aligned}$$

Mutta tästä saadaan

$$|\varepsilon_1| \leq \frac{M_2}{2} \int_0^h (hs - s^2)ds = \frac{M_2}{12} h^3$$

Sama lasku voidaan tehdä joka välillä joten

$$|\mathcal{E}_{\text{tr}}| \leq |\varepsilon_1| + \dots + |\varepsilon_n| \leq \frac{nM_2}{12} h^3 = \frac{M_2}{12} h^2$$

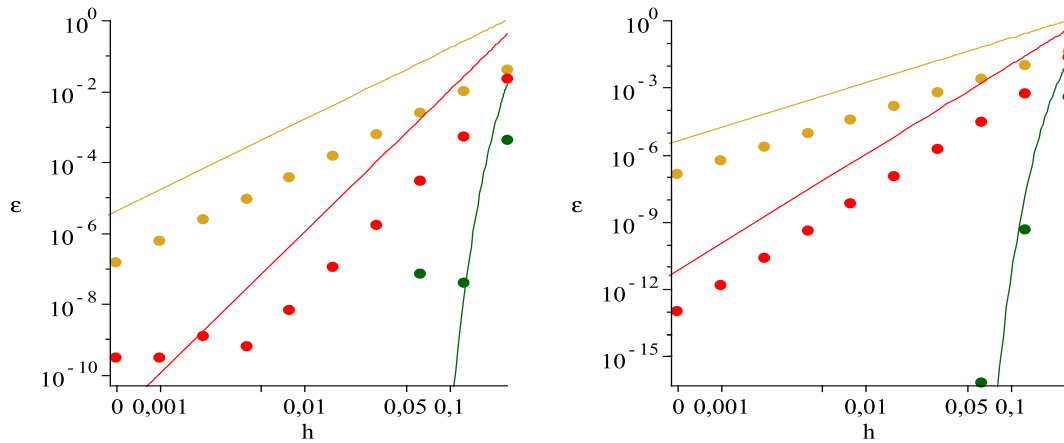
✧

Täsmälleen samaa ideaa voidaan käyttää Simpsonin ja Gaussin kaavojen virheen analyysissä. Menemättä sen kummemmin yksityiskohtiin todetaan vain tulos. Asia on perusteellisesti tarkasteltu kirjassa [12].

Lemma 5.5.

$$\begin{aligned} |\mathcal{E}_{\text{si}}| &= \left| \int_0^1 f(x)dx - \mathcal{I}_{\text{si},h}(f) \right| \leq \frac{M_4}{180} h^4 \quad \text{ja} \\ |\mathcal{E}_{\text{ga}}| &= \left| \int_0^1 f(x)dx - \mathcal{I}_{\text{ga},n}(f) \right| \leq \frac{2M_{2n}(n!)^4}{((2n)!)^3(2n+1)} \end{aligned}$$

Esimerkki 5.6. Olkoon $f(x) = 2\cos(10x) + e^{2x}$. Koska Gaussin kaavat eivät ole tasavälisiä, niin h ei oikeastaan ole siinä mielekäs parametri. Mutta n on: sehän kuvaa työmäärää. Jos siis valitaan Gaussin menetelmässä n pistettä, niin tätä vastaa



Kuva 5.1: Vasemmalla laskettu MAPLEN oletustarkkuudella, jossa käytetään 10 desimaalia. Oikealla on laskettu 20 desimaalilla. Kuvaan on myös piirretty kaavoja (5.4) vastaavat arviot virheen ylärajalle.

parametri $h = 1/(n - 1)$ trapetsimenetelmässä ja Simpsonin menetelmässä. Kuvassa 5.1 on laskettu integraalin arvoja eri parametrien arvoilla. Huomaa, että

$$\max_{0 \leq x \leq 1} |f^{(n)}(x)| \approx 2 \cdot 10^n$$

Siis saadaan virhearviot

$$\begin{aligned} |\mathcal{E}_{\text{tr}}| &\approx 17 h^2 \\ |\mathcal{E}_{\text{si}}| &\approx 110 h^4 \\ |\mathcal{E}_{\text{ga}}| &\approx \frac{4 \cdot 10^{2n} (n!)^4}{((2n)!)^3 (2n + 1)} \end{aligned} \quad (5.4)$$

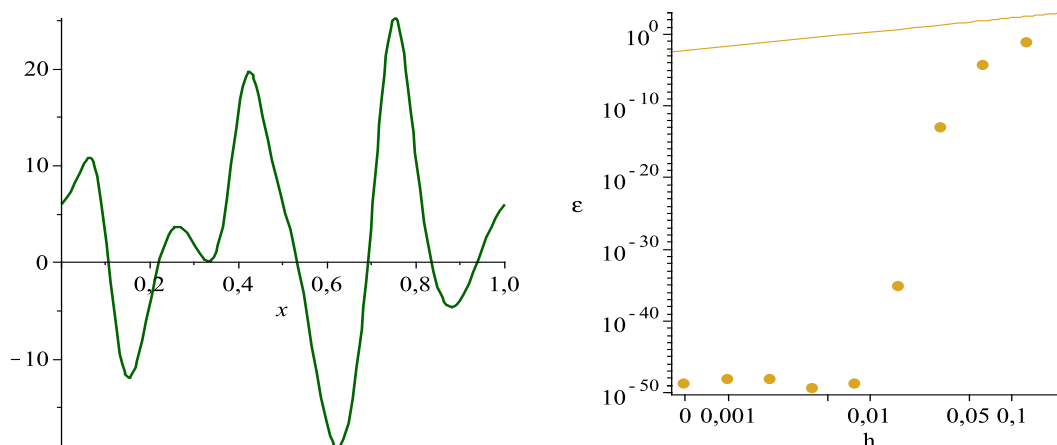
Kuten kuvasta 5.1 nähdään niin virhe pienenee odotettua vauhtia. ★

5.3 Muutamia erityiskysymyksiä

5.3.1 Jaksolliset funktiot

Muistetaan, että funktio f on *jaksollinen*, jos on olemassa jokin $c > 0$ siten, että $f(x + c) = f(x)$ kaikilla x . Vakio c on *jakso*. Toisaalta jos funktio on annettu vain äärellisellä välillä $[a, b]$, niin se voidaan jaksollisesti jatkaa koko $\mathbb{R}$:lle. Olkoon $c = b - a$ ja asetetaan $\tilde{f}(x + nc) = f(x)$ kaikilla n . $\tilde{f}$ on f :n jaksollinen laajennus. Jos $f(a) \neq f(b)$, niin $\tilde{f}$ on epäjatkuva. Muistetaan, että jos jaksollista funktiota integroidaan koko jakson pituuden yli, niin ei ole väliä mistä pisteestä aloitetaan:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{a+r}^{b+r} f(x) dx$$



Kuva 5.2: jotain.

Tarkastellaan seuraavassa tilannetta, jossa f on *sileästi jaksollinen*. Tällä tarkoitetaan sitä, että $f(a) = f(b)$, $f'(a) = f'(b)$ ja yleisesti $f^{(n)}(a) = f^{(n)}(b)$ kaikilla n . Oletetaan lisäksi, että jakso on yksi, joten riittää tarkastella väliä $[0, 1]$.

Nyt osoittautuu, että jos lasketaan sileästi jaksollisen funktion integraali trapetsikaavalla niin tulos on erittäin tarkka, jopa parempi kuin Gaussin kaavoilla.

Esimerkki 5.7. Olkoon

$$f(x) = 5 \cos(8\pi x) + 3 \exp(2 \sin(6\pi x)) - 2 \exp(2 \sin(4\pi x))$$

Selvästi f on sileästi jaksollinen. Kuvassa 5.2 on f ja trapetsimenetelmän virhe eri h :n arvoilla. Tämä on laskettu MAPLELLA käyttäen 50 merkitsevää numeroa, joten suhteellinen virhe ei voi olla pienempi kuin 10^{-50} . Joka tapauksessa nähdään että jo suhteellisen isoilla h :n arvoilla tarkkuus on hämmästyttävän hyvä. ★

Intuiitiivisesti voisi ajatella, että tässä tapauksessa positiiviset ja negatiiviset virheet kumoavat toisensa käsittämättömän hyvin. Selitys tälle ilmiölle löytyy kirjasta [12].

5.3.2 Singulaarisuudet

On siis löydetty tehokkaita menetelmiä ratkaisemaan sellaisia ongelmia, joissa integroitava funktio on sileä. Virheen ylärajan arviothan perustuivat integroitavan funktion derivaattojen maksimi-arvoihin. Jos kyseiset derivaatat eivät ole olemassa joissain pisteissä niin suppeneminen on hitaampaa.

Jos singulaarinen piste on integroitavan välin sisällä niin integroimisväli voidaan jakaa osiin. Yleisyyttä rajoittamatta voidaan siis olettaa, että integroitavan funktion singulaarisuus on välin päässä. Tarkastellaan seuraavaa tehtävää:

$$\int_0^2 \cos(x) \sqrt{x} dx$$

Selvästi $f'(x) \rightarrow \infty$ kun $x \rightarrow 0$, joten suppeneminen on hidasta. Tässä tapauksessa ongelma ratkeaa helposti sopivalla muuttujan vaihdolla. Olkoon $x = y^2$, tämä antaa

$$\int_0^2 \cos(x) \sqrt{x} dx = 2 \int_0^{\sqrt{2}} \cos(y^2) y^2 dy$$

Nyt integroitava funktio on sileä, joten integrointikaavat toimivat totuttuun tapaan.

5.3.3 Moniulotteinen integraali

Lähdetään tässäkin liikkeelle yksinkertaisesta tapauksesta jossa halutaan integroida annettu funktio yksikköneliössä $I \times I = [0, 1] \times [0, 1]$. Olkoon siis $f : I \times I \rightarrow \mathbb{R}$ jatkuva funktio ja halutaan approksimaatio integraalille

$$\int_{I \times I} f(x, y) dx dy = ?$$

Varsin suoraviivaisesti voidaan yleistää yksiulotteinen tapaus. Valitaan jotkin painokertoimet c_j ja pisteet x_j kuten kaavassa (5.1). Olkoon edelleen $g(y) = \int_0^1 f(x, y) dx$, jolloin

$$\begin{aligned} \int_{I \times I} f(x, y) dx dy &= \int_0^1 g(y) dy \approx \sum_{j=1}^n c_j g(x_j) \\ &\approx \sum_{j=1}^n c_j \sum_{i=1}^n c_i f(x_i, x_j) = \sum_{i,j=1}^n c_i c_j f(x_i, x_j) \end{aligned}$$

Huomattakoon, että ei ole tarpeen käyttää samaa integrointimenetelmää x - ja y -suunnissa. Nyt voidaan osoittaa, että approksimaatio antaa tarkkuuden, jota voisi olettaa yksiulotteisen tapauksen perusteella.

Esimerkki 5.8. Olkoon $f(x, y) = 2 \exp(2x - y)$ ja lasketaan approksimaatio käyttäen Simpsonin menetelmää. Olkoon virhe $\mathcal{E}_n$. Saadaan seuraava taulukko

n	$\mathcal{E}_n$	$\mathcal{E}_n/\mathcal{E}_{2n}$
4	$1.45 \cdot 10^{-3}$	15.67
8	$9.25 \cdot 10^{-5}$	15.91
16	$5.81 \cdot 10^{-6}$	15.97
32	$3.64 \cdot 10^{-7}$	

Kuten nähdään niin virhe pienenee odotetusti: $\mathcal{E}_n = \mathcal{O}(h^4)$ kuten yksiulotteisessakin tapauksessa. ★

Entäpä jos halutaan integroida jossain monimutkaisemmassa alueessa? Olkoon $\varphi : I \times I \rightarrow \Omega$ *diffeomorfismi*. Siis vaaditaan, että

- (i) φ on bijektio
- (ii) $\varphi \in C^1(I \times I)$ ja $\varphi^{-1} \in C^1(\Omega)$

Tästä seuraa, että differentiaalille $d\varphi$ pätee $\det(d\varphi) \neq 0$ ja voidaan aina itse asiassa valita $\det(d\varphi) > 0$. Näillä merkinnöillä saadaan

$$\int_{\Omega} f dx dy = \int_{I \times I} f \circ \varphi \det(d\varphi) dx dy$$

Jos siis tällainen funktio φ löydetään, niin integraalin laskenta voidaan palauttaa yksikköneliöön.

5.4 Harjoitustehtäviä

1. Laske Gaussin integrointikaava jossa on 3 pistettä. Ohje: olkoon pisteet $x_1 < x_2 < x_3$ ja niitä vastaavat kertoimet c_j . Symmetria-argumentin perusteella voidaan arvella, että $x_2 = 1/2$ ja $x_1 = 1/2 - a$ ja $x_3 = 1/2 + a$. Edelleen luulisi pätevän, että $c_1 = c_3$.
2. Poista singulaarisuus sopivalla muuttujan vaihdolla

$$\int_0^2 \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx$$