LISÄYKSIÄ

kirjaan Reaalimuuttujan analyysi

13.6. Numeerinen integrointi: Gaussin kaavat

Edellä käsitellyt numeerisen integroinnin kaavat eli *kvadratuurikaavat* — Riemannin summa, puolisuunnikassääntö ja Simpsonin sääntö — voidaan tulkita painotetuiksi keskiarvoiksi sopivissa pisteissä lasketuista funktion arvoista. Painojen summa on integroimisvälin pituus. Kaavat ovat siten periaatteessa muotoa

$$Q(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k),$$

missä kertoimet w_k ovat *painot* ja funktion arvot lasketaan *tukipisteissä* x_k.

Puolisuunnikassääntö integroi tarkasti jokaisen ensimmäisen asteen polynomin, Simpsonin sääntö jokaisen kolmannen asteen polynomin. Tukipisteet on tällöin valittu tasavälisesti. Voidaan kysyä, onko mahdollista päästä parempaan tulokseen — ts. siihen että korkeampaa astetta oleva polynomi integroituu tarkasti — jos luovutaan tukipisteiden tasavälisyydestä. Tällöin tukipisteet valittaisiin tarkan integroitumisen kannalta optimaalisella tavalla.

Tarkastelu rajoitetaan seuraavassa koskemaan integroimisväliä $[-1, 1]$. Tämä ei ole oleellinen rajoitus, sillä minkä tahansa välin $[a, b]$ yli otettu integraali voidaan muuntaa sijoituksella

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2},$$

jolloin

$$\int_a^b f(x)\, dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2}\right) dt.$$

Olkoon aluksi tarkasteltavana kahteen tukipisteeseen x_0 ja x_1 perustuva kvadratuurikaava

$$Q_1(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1).$$

Painot w_0, w_1 ja tukipisteet x_0, x_1 pyritään määräämään siten, että mahdollisimman korkea-asteiset polynomit integroituvat tarkasti yli välin $[-1, 1]$. Tarkkaa integraalia merkitään

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx.$$

Koska tuntemattomia on neljä, voidaan yrittää vaatia potenssien x^j, $j = 0, 1, 2, 3$ tarkka integroituminen:

$$\begin{cases} Q_1(1) = I(1) & \text{eli} \quad w_0 + w_1 = 2, \\ Q_1(x) = I(x) & \text{eli} \quad w_0 x_0 + w_1 x_1 = 0, \\ Q_1(x^2) = I(x^2) & \text{eli} \quad w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 = \frac{2}{3}, \\ Q_1(x^3) = I(x^3) & \text{eli} \quad w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 = 0. \end{cases}$$

Kyseessä on epälineaarinen yhtälöryhmä, jonka ratkaisu kuitenkin on helposti löydettävissä:

$$w_0 = w_1 = 1, \quad -x_0 = x_1 = \tfrac{1}{\sqrt{3}} = 0.57735\ldots.$$

Saadut tukipisteet sijaitsevat integroimisvälillä ja painojen summa on välin pituus, kuten on luonnollista odottaa.

Tuloksena on kertalukua 1 oleva *Gaussin kvadratuuri* (eli numeerisen integroinnin kaava)

$$Q_1(f) = f(-\tfrac{1}{\sqrt{3}}) + f(\tfrac{1}{\sqrt{3}}).$$

Voidaan osoittaa, että integrointivirheelle pätee

$$|I(f) - Q_1(f)| \le \frac{1}{135} \max_{x \in [-1,1]} |f^{(4)}(x)|.$$

Vastaavalla tavalla voidaan johtaa korkeampien kertalukujen kvadratuurikaavoja. Toisen kertaluvun kvadratuurissa

$$Q_2(f) = w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

tukipisteitä on kolme ja voidaan vaatia potenssien x^j, $j = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, tarkka integroituminen:

$$\begin{cases} Q_2(1) = I(1) & \text{eli} \quad w_0 + w_1 + w_2 = 2, \\ Q_2(x) = I(x) & \text{eli} \quad w_0 x_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 = 0, \\ Q_2(x^2) = I(x^2) & \text{eli} \quad w_0 x_0^2 + w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 = \frac{2}{3}, \\ Q_2(x^3) = I(x^3) & \text{eli} \quad w_0 x_0^3 + w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 = 0, \\ Q_2(x^4) = I(x^4) & \text{eli} \quad w_0 x_0^4 + w_1 x_1^4 + w_2 x_2^4 = \frac{2}{5}, \\ Q_2(x^5) = I(x^5) & \text{eli} \quad w_0 x_0^5 + w_1 x_1^5 + w_2 x_2^5 = 0. \end{cases}$$

Syntyvä epälineaarinen yhtälöryhmä on hieman vaikeammin, mutta kuitenkin algebrallisesti ratkaistavissa:

$$\begin{aligned} w_0 = w_2 &= \tfrac{5}{9} = 0.55555\ldots, \qquad w_1 = \tfrac{8}{9} = 0.88888\ldots, \\ -x_0 = x_2 &= \sqrt{\tfrac{3}{5}} = 0.77459\ldots, \quad x_1 = 0. \end{aligned}$$

Kertalukua 2 oleva Gaussin kvadratuuri on siten

$$Q_2(f) \approx 0.5556\, f(-0.7746) + 0.8889\, f(0) + 0.5556\, f(0.7746).$$

Integrointivirheelle voidaan laskea arvio

$$|I(f) - Q_2(f)| \leq \frac{1}{15750} \max_{x \in [-1,1]} |f^{(6)}(x)|.$$

Kertaluvun n tapauksessa kvadratuurikaava on

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k).$$

Painoja ja tukipisteitä on yhteensä $2n+2$, jolloin voidaan vaatia potenssien x^j, $j = 0, 1, \ldots, 2n+1$, tarkka integroituminen. Syntyvän epälineaarisen yhtälöryhmän ratkaiseminen käy kuitenkin vaikeaksi kertaluvun kasvaessa.

Tukipisteet voidaankin löytää helpommin erään polynomin nollakohtina:

Olkoon $p(x)$ astetta $n+1$ oleva polynomi, joka toteuttaa integraaliehdot

$$\int_{-1}^{1} x^j p(x)\, dx = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, n.$$

Nämä voidaan ilmeisestikin lausua myös muodossa

$$\int_{-1}^{1} p(x)q(x)\, dx = 0 \quad \text{kaikilla polynomeilla } q,\ \deg q \leq n.$$

Polynomia p kutsutaan potenssien x^j *ortogonaalipolynomiksi*. Ajatuksena on tulkita lauseke

$$(p \mid q) = \int_{-1}^{1} p(x)q(x)\, dx$$

sisätuloksi; sillä nimittäin on luonteenomaiset sisätulon ominaisuudet (vrt. AG, lause 5.7.2). Jos kahden vektorin — tai polynomin — sisätulo on $= 0$, niitä on tapana kutsua ortogonaalisiksi, mistä nimitys ortogonaalipolynomi. Muunlaista, esimerkiksi polynomien kuvaajiin liittyvää kohtisuoruutta eivät integraaliehdot tarkoita.

Lause 13.6.1. Integraaliehdot

$$\int_{-1}^{1} x^j p(x)\, dx = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, n,$$

täyttävä astetta $n+1$ oleva polynomi p on olemassa. Se on yksikäsitteinen, kun astetta $n+1$ olevan termin kertoimeksi kiinnitetään 1.

Todistus. Merkitään $p(x) = \sum_{k=0}^{n+1} a_k x^k$. Kun tämä sijoitetaan integraaliehtoihin, saadaan kertoimille a_k homogeeninen (ts. yhtälöryhmän vakiotermit ovat $= 0$) lineaarinen yhtälöryhmä, jossa on $n+1$ yhtälöä ja $n+2$ tuntematonta. Tällaisella yhtälöryhmällä on äärettömän monta ratkaisua; siis myös muita kuin nollien muodostama ratkaisu.

Yhtälöryhmällä on ratkaisu, jossa korkeimman potenssin kerroin a_{n+1} on $\neq 0$. Jos näin ei olisi, olisi polynomi p enintään astetta n ja integraaliehtojen perusteella olisi $\int_{-1}^{1} p(x)p(x)\,dx = 0$. Tällöin olisi $p(x) = 0$ kaikilla x ja yhtälöryhmällä olisikin vain yksi ratkaisu: $a_0 = a_1 = \cdots = a_{n+1} = 0$.

Polynomi p voidaan jakaa korkeimman potenssin kertoimella, jolloin saadaan polynomi, jossa korkeimman potenssin kerroin on 1. Jakaminen ei vaikuta integraaliehtojen toteutumiseen. Jos olisi olemassa kaksi erilaista tällaista polynomia, p_1 ja p_2, olisi

$$\int_{-1}^{1} [p_1(x) - p_2(x)]q(x)\,dx = 0$$

kaikilla enintään asetta n olevilla polynomeilla q. Erotus $p_1 - p_2$ on itse enintään astetta n, jolloin siis on

$$\int_{-1}^{1} [p_1(x) - p_2(x)]^2\,dx = 0.$$

Tästä seuraa, että polynomit ovat samat: $p_1 = p_2$. ■

Lause 13.6.2. Jos astetta $n+1$ olevalle polynomille $p(x)$ pätee

$$\int_{-1}^{1} x^j p(x)\,dx = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, n,$$

niin sen nollakohdat x_k, $k = 0, 1, \ldots, n$ ovat eri suuret, reaaliset ja sijaitsevat välillä $[-1, 1]$.

Todistus. Olkoot $x_1, x_2, \ldots, x_r$ sellaiset polynomin p välillä $[-1, 1]$ sijaitsevat nollakohdat, joissa $p(x)$ vaihtaa merkkinsä. Jos kaikki nollakohdat eivät ole eri suuria, reaalisia ja sijaitse välillä $[-1, 1]$, on $r < n+1$. Polynomi

$$q(x) = (x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_r)$$

on tällöin enintään astetta n ja integraaliehtojen perusteella on siis

$$\int_{-1}^{1} p(x)q(x)\,dx = 0.$$

Koska sekä p että q vaihtavat merkkiään pisteissä $x_1, x_2, \ldots, x_r$, tulo $p(x)q(x)$ ei vaihda niissä merkkiään, vaan on koko integrointivälillä määrätynmerkkinen (joko positiivinen tai negatiivinen). Tällöin integraali

$$\int_{-1}^{1} p(x)q(x)\,dx$$

ei voi olla $= 0$.

Ainoa mahdollisuus on, että $r = n+1$, ts. polynomin p kaikki nollakohdat sijaitsevat välillä $[-1,1]$, ovat reaalisia ja eri suuria. ■

Lause 13.6.3. Kertalukua n olevan Gaussin kvadratuurin

$$Q_n(f) = \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k)$$

tukipisteet x_k, $k = 0,1,\ldots,n$, ovat potenssien x^j, $j = 0,1,\ldots,n$, ortogonaalipolynomin $p(x)$ nollakohdat. Vastaavat painot w_k, $k = 0,1,\ldots,n$, saadaan integroimalla tukipisteisiin liittyvät Lagrangen interpolaation apufunktiot $L_k(x)$, $k = 0,1,\ldots,n$:

$$w_k = \int_{-1}^{1} L_k(x)\,dx, \qquad k = 0,1,\ldots,n.$$

Todistus. On osoitettava, että kvadratuurikaava integroi tarkasti potenssit x^j, $j = 0,1,\ldots,2n+1$, välillä $[-1,1]$, kun tukipisteet ja painot valitaan em. tavalla.

Jakamalla potenssi x^j, missä $j = 0,1,\ldots,2n+1$, astetta $n+1$ olevalla polynomilla p saadaan osamääräksi polynomi q ja jakojäännökseksi polynomi r. Nämä ovat kumpikin enintään astetta n. On siis $x^j = pq + r$ ja integroimalla yli välin $[-1,1]$ saadaan

$$I(x^j) = I(pq+r) = I(pq) + I(r).$$

Koska $I(x^j p) = 0$, kun $j = 0,1,\ldots,n$, ja q on enintään astetta n, on $I(pq) = 0$.

Koska r on enintään astetta n, se yhtyy astetta n olevaan Lagrangen interpolaatiopolynomiinsa ja

$$\begin{aligned} I(r) = \int_{-1}^{1} r(x)\,dx = \int_{-1}^{1} \sum_{k=0}^{n} r(x_k)L_k(x)\,dx \\ = \sum_{k=0}^{n} r(x_k)\left[\int_{-1}^{1} L_k(x)\,dx\right] = \sum_{k=0}^{n} w_k r(x_k). \end{aligned}$$

Koska $p(x_k) = 0$, on $x_k^j = p(x_k)q(x_k) + r(x_k) = r(x_k)$ jokaisessa tukipisteessä x_k.

Yhdistämällä tulokset saadaan

$$I(x^j) = I(pq) + I(r) = I(r) = \sum_{k=0}^{n} w_k r(x_k) = \sum_{k=0}^{n} w_k x_k^j = Q_n(x^j)$$

jokaiselle eksponentille $j = 0, 1, \ldots, 2n+1$. Nämä potenssit siis integroituvat tarkasti. ■

Kertalukua n olevan Gaussin kvadratuurin virhe voidaan myös lausua vastaavan ortogonaalipolynomin p_{n+1} avulla; oletetaan, että tässä on korkeimman potenssin kerroin normeerattu arvoon 1. Virheen ylärajaksi saadaan

$$|I(f) - Q_n(f)| \leq \frac{1}{(2n+2)!} \left[\int_{-1}^{1} p_{n+1}(x)^2\, dx\right] \max_{x \in [-1,1]} |f^{(2n+2)}(x)|.$$

Tämän todistaminen edellyttää tässä käsiteltyä laajempia interpolaatiotarkasteluja (ns. Hermiten interpolaatiota) ja sivuutetaan.

Esimerkki 13.6.4. Kertalukua 3 olevan Gaussin kvadratuurin johtamiseksi on muodostettava polynomi $p(x) = a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$, joka toteuttaa integraaliehdot

$$\int_{-1}^{1} p(x)\, dx = \int_{-1}^{1} xp(x)\, dx = \int_{-1}^{1} x^2 p(x)\, dx = \int_{-1}^{1} x^3 p(x)\, dx = 0.$$

Nämä johtavat lineaariseen yhtälöryhmään

$$\begin{cases} \dfrac{a_4}{5} + \dfrac{a_2}{3} + a_0 = 0, \\ \dfrac{a_3}{5} + \dfrac{a_1}{3} = 0, \\ \dfrac{a_4}{7} + \dfrac{a_2}{5} + \dfrac{a_0}{3} = 0, \\ \dfrac{a_3}{7} + \dfrac{a_1}{5} = 0, \end{cases}$$

jonka ratkaisu on $a_0 = \frac{3}{35}a_4$, $a_1 = 0$, $a_2 = -\frac{6}{7}a_4$, $a_3 = 0$. Ortogonaalipolynomi, jonka korkeimman asteen termin kerroin on $= 1$, on siten

$$x^4 - \tfrac{6}{7}x^2 + \tfrac{3}{35}.$$

Tämän nollakohdat ovat kvadratuurin tukipisteet

$$x_0 \approx -0.861136,\ x_1 \approx -0.339981,\ x_2 \approx 0.339981,\ x_3 \approx 0.861136.$$

Muodostamalla tukipisteisiin liittyvät Lagrangen interpolaation apufunktiot

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}, \quad L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)},$$
$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}, \quad L_3(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

ja integroimalla nämä välin $[-1,1]$ yli saadaan vastaavat painot:

$$w_0 = w_3 = 0.347855, \; w_1 = w_2 = 0.652145.$$

Kvadratuuri on siten

$$Q_3(f) \approx 0.347855\, f(-0.861136) + 0.652145\, f(-0.339981) + 0.652145\, f(0.339981) + 0.347855\, f(0.861136).$$

Integrointivirheen ylärajaksi saadaan

$$|I(f) - Q_3(f)| \leq \frac{1}{8!}\left[\int_{-1}^{1} (x^4 - \tfrac{6}{7}x^2 + \tfrac{3}{35})^2\,dx\right] \max_{x\in[-1,1]} |f^{(8)}(x)| = \frac{1}{3472875} \max_{x\in[-1,1]} |f^{(8)}(x)|. \;\blacksquare$$

Esimerkki 13.6.5. Olkoon laskettavana integraali (vrt. esimerkkiin 13.5.1)

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}.$$

Tekemällä sijoitus $x = \frac{1}{2}t + \frac{1}{2}$ tämä saadaan muotoon

$$\int_{-1}^{1} \frac{2}{4+(t+1)^2}\,dt.$$

Soveltamalla eri kertalukujen Gaussin kvadratuureja saadaan integraalille seuraavat numeeriset approksimaatiot:

kertaluku	integr. arvo
1	0.786885
2	0.785267
3	0.785403
4	0.785398
5	0.785398

Integraalin tarkka arvo on $\frac{\pi}{4} \approx 0.785398$. $\blacksquare$