Numeerinen integrointi

Analyyttisesti derivointi triviaalia, integrointi vaikeaa.

Numeerisesti laskettaessa tilanne on päinvastainen. Integrointi on yhteenlaskua, joka on tasoittava operaatio: lähtötietojen satunnaiset virheet kumoavat toisensa.

Derivointiin sen sijaan liittyy lähes yhtäsuurten suureiden vähennyslasku, joka on virheitä vahvistava operaatio. Vrt. kuvankäsittelyn terävöintioperaatio, joka lisää kohinaa.

Jos käsitellään havaintodataa, se voi olla syytä tasoittaa sopivalla suotimella tai kuvata aineistoon sovitettavalla funktiolla. Ei useinkaan tarpeen integroitaessa, välttämätöntä derivoitaessa.

Funktio f on integroituva välillä $[x_1 = a, x_n = b]$, jos Riemannin summalla

$$R = \sum_{i=1}^{n-1} f(\xi_i) h_i,$$

missä

$$h_i = x_{i+1} - x_i, \quad \xi_i \in [x_i, x_{i+1}],$$

on raja-arvo, kun jaon silmä $h = \max_i \{h_i\} \to 0$.

Muuttamalla jakovälejä ja pisteiden ξ_i valintaa saadaan erilaisia integrointimenetelmiä.

Jaetaan integroimisväli yhtä leveisiin viipaleisiin. Olkoon kunkin leveys h.

1) Lasketaan integroitava kunkin välin alkupisteessä:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = h(f(x_0) + f(x_0+h) + \ldots + f(x_0+(n-1)h)).$$

Esimerkki:

$$I = \int_0^1 x^2\,dx.$$

Oikea lopputulos on tietenkin 1/3. Lasketaan nyt integraalin likiarvo jakamalla integroimisväli neljään osaan.

$$I_4 = \frac{1}{4}\left(0 + \frac{1}{16} + \frac{1}{4} + \frac{9}{16}\right) = \frac{14}{64} \approx 0.219.$$

Koska integroitava funktio on koko välillä kasvava ja funktio lasketaan välin alkupäässä, saadaan liian pieni arvo.

2) Lasketaan arvo välin keskikohdalla

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = h(f(x_0+h/2) + f(x_0+3h/2) + \ldots).$$

$$I_4 = \frac{1}{4}\left(\frac{1}{64} + \frac{9}{64} + \frac{25}{64} + \frac{49}{64}\right) = \frac{21}{64} \approx 0.328.$$

Puolisuunnikasmenetelmä

Korvataan integroitava interpolointipolynomilla

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = \int_{x_0}^{x_n} P_k(x)\,dx.$$

Kun $k = 1$, saadaan yhdelle osavälille

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_1} (f_0 + s\Delta f_0)\,dx \\
&= h\int_{s=0}^{s=1} (f_0 + s\Delta f_0)\,ds \\
&= h(f_0 + \frac{1}{2}\Delta f_0)\,ds \\
&= \frac{h}{2}(2f_0 + (f_1 - f_0)) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1).
\end{aligned}$$

Integraali koko välin yli on

$$\begin{aligned}
\int f(x)\,dx &= \frac{h}{2}(f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \ldots + 2f_{n-1} + f_n) \\
&= \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_0 + h) + 2f(x_0 + 2h) + \ldots \\
&\qquad + 2f(x_0 + (n-1)h) + f(x_0 + nh)).
\end{aligned}$$

Virhearvio

Interpolointipolynomin virhe on korkeintaan samaa luokkaa kuin ensimmäinen poisjätetty termi.

$$\begin{aligned} \Delta f_0 &= f_1 - f_0 \approx h\frac{df}{dx} \\ \Delta^2 f_0 &= \Delta f_1 - \Delta f_0 \approx h^2\frac{d^2 f}{dx^2} \\ &\vdots \\ \Delta^n f_0 &\approx h^n \frac{d^n f}{dx^n} \end{aligned}$$

Newtonin-Gregoryn interpolointipolynomin kolmas termi on

$$\frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0 = \frac{s(s-1)}{2}h^2 f''(\xi),$$

missä $x_0 \le \xi \le x_s$.

Integroidaan tämä yhden osavälin yli, jolloin saadaan *lokaali virhe*:

$$\begin{aligned} &\int_{x_0}^{x_1} \frac{s(s-1)}{2}h^2 f''(\xi)\,dx \\ &= h^2 f''(\xi) h \int_0^1 \frac{s^2-s}{2}\,ds \\ &= -\frac{1}{12}h^3 f''(\xi). \end{aligned}$$

Välejä on $1/h$ kappaletta, joten *globaali virhe* on luokkaa $h^2 f''(\xi)$.

Esimerkkitapauksen integraali on

$$I_4 = \frac{1}{8}\left(\frac{1}{16} + \frac{1}{2} + \frac{9}{8} + 1\right) = \frac{43}{6\times 16} \approx 0.336.$$

Funktion toinen derivaatta on identtisesti 2, joten virharvion mukaan globaali virhe on korkeintaan

$$\frac{1}{12}h^2 f''(\xi) = \frac{1}{12}\frac{1}{4^2}2 = 0.010.$$

Simpsonin menetelmä

Käytetään mutkikkaampia käyriä, jotka kuvaavat alkuperäistä funktiota vielä paremmin kuin suorat. Luonnollinen parannus on toisen asteen käyrä.

Lasketaan ensin integraali yhden osavälin yli. Aikaisemman interpolointikaavan mukaan on

$$f(x) \approx f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0.$$

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx &\approx \int_{x_0}^{x_2} \left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0\right) dx \\
&= h\int_0^2 \left(f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2}\Delta^2 f_0\right) ds \\
&= h(2f_0 + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3}\Delta^2 f_0) \\
&= \frac{h}{3}(6f_0 + 6\Delta f_0 + \Delta^2 f_0)
\end{aligned}$$

Sijoitetaan tähän

$$\begin{aligned}
\Delta f_0 &= f_1 - f_0 \\
\Delta^2 f_0 &= \Delta f_1 - \Delta f_0 = (f_2 - f_1) - (f_1 - f_0) \\
&= f_0 - 2f_1 + f_2.
\end{aligned}$$

Integraali kahden jakoväli yli on

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)).$$

Integraali koko välin yli on

$$
\begin{aligned}
&\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx \\
&\approx \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_0+h) + 2f(x_0+2h) + 4f(x_0+3h) + 2f(x_0+4h) + \ldots \\
&\quad 4f(x_0+(n-1)h) + f(x_0+nh).
\end{aligned}
$$

Jakovälejä oltava parillinen määrä.

Kuten edellä voidaan laskea, että globaali virhe on luokkaa h^4????.

Esimerkkitapaus:

$$
I_4 = \frac{1}{12}\left(4 \times \frac{1}{16} + 2 \times \frac{1}{4} + 4 \times \frac{9}{16} + 1\right) = \frac{16}{12 \times 4} = \frac{1}{3}.
$$

```
program simpson
  implicit none
  integer i
  do i=4,10
    write(*,*) i, simpsonint(0.0, 1.0, i)
  end do
contains

real function f(x)
  ! integroitava funktio
  real, intent(in) :: x
  f=x**4
end function

real function simpsonint(a, b, n)
  ! integroidaan funktio f(x) valin [a, b] yli Simpsonin
  ! menetelmalla kayttamalla n jakovalia (n oltava parilli-
nen)
  real, intent(in) :: a, b
  integer, intent(in) :: n

  real :: h, &    ! askelpituus
          s2, s4  ! osasummat
  integer i

  if (2*(n/2) /= n) then
    write(*,*) 'jakovalien maaran oltava parillinen:',n
    simpsonint=0.0
    return
  end if

  h = (b-a)/n
  s2=0.0
  s4=0.0
  do i=1,n-1,2
    s4=s4+f(a+i*h)
  end do
  do i=2,n-2,2
    s2=s2+f(a+i*h)
  end do
  simpsonint = (h/3)*(f(a)+f(b)+2*s2+4*s4)
end function
end program
```

```
 4 0.200520843
 jakovalien maaran oltava parillinen: 5
 5 0.00000000E+00
 6 0.200102881
 jakovalien maaran oltava parillinen: 7
 7 0.00000000E+00
 8 0.200032562
 jakovalien maaran oltava parillinen: 9
 9 0.00000000E+00
 10 0.200013325
```

Rombergin menetelmä

Lasketaan integraali jollakin yksinkertaisella menetelmällä kahdella eri askelpituudella. Näiden arvojen avulla ekstrapoloidaan uusi tarkempi arvo.

Olkoon I on integraalin tarkka arvo. Voidaan osoittaa, että puolisuunnikasmenetelmän arvo askelpituuden funktiona $R_0(h)$ on

$$R_0(h) = I + C_2 h^2 + C_4 h^4 + \dots,$$

missä kertoimet C_i eivät riipu askelesta h.

$$R_0(h/2) = I + C_2 \frac{h^2}{4} + C_4 \frac{h^4}{16} + \dots,$$

Lasketaan näistä lineaarikombinaatio

$$\begin{aligned} R_1(h) &= \frac{1}{3}\left(4R_0(h/2) - R_0(h)\right) \\ &= I + C_4' h^4 + \dots, \end{aligned}$$

Alkuperäinen menetelmä on kertalukua h^2, mutta niistä muodostettu kombinaatio kertalukua h^4.

Jos aineistona askelpituudella h taulukoituja arvoja, lasketaan integraalit askelilla $2h$ ja h.

Menetelmää voidaan jatkaa edelleen korkeampiin kertalukuihin.

Newtonin–Cotesin menetelmät

Kaikki edellä olleet integrointimenetelmät voidaan esittää muodossa

$$I = \sum w_i f(x_i),$$

missä $(x_i), i = 0, \ldots, n$ on jokin sopivasti valittu pistejoukko.

Jos pisteet x_i valitaan tasavälisesti, saadaan Newtonin–Cotesin menetelminä tunnetut integrointimenetelmät.

Kaikki edellä esiintyneet menetelmät kuuluvat tähän ryhmään.

Edellä esitetyt menetelmät ovat yksinkertaisia ja helposti ohjelmoitavia. Moniin tarkoituksiin ne ovat täysin käyttökelpoisia. Suuri tarkkuus vaatii lyhyttä jakoväliä, mikä tekee menetelmistä melko hitaita.

Gaussin kvadratuuri

Tilannetta voidaan parantaa valitsemalla jakopisteet x_i jollakin muulla tavoin kuin tasavälisesti.

Oletetaan, että funktio on korkeintaan n-asteinen polynomi. Yritetään löytää sellaiset pisteet x_i ja kertoimet w_i, että $\sum w_i f(x_i)$ antaa polynomien integraaleille täsmälleen oikean arvon.

Esimerkki: käytetään vain kahta pistettä. Valitaan vielä integroimisväli symmetriseksi, $[-1, 1]$.

Jotta kaava toimisi oikein kaikille astetta n astetta oleville polynomeille, sen on annettava oikeat arvot myös funktioiden 1, x, x^2, $\ldots$, x^n integraaleille:

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} 1\,dx &= 2 = w_1 + w_2, \\
\int_{-1}^{1} x\,dx &= 0 = w_1 x_1 + w_2 x_2, \\
\int_{-1}^{1} x^2\,dx &= \frac{2}{3} = w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2, \\
\int_{-1}^{1} x^3\,dx &= 0 = w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3,
\end{aligned}
$$

Tässä on neljä yhtälöä ja neljä tuntematonta, w_1, w_2, x_1 ja x_2. Toinen ja neljäs yhtälö toteutuu, jos valitaan $x_2 = -x_1$ ja $w_1 = w_2$. Silloin ensimmäisen yhtälön perusteella on $w_1 = w_2 = 1$, ja kolmannesta yhtälöstä saadaan $x_1 = -x_2 = 1/\sqrt{3}$.

Yleiset kolmannen asteen polynomit saadaan edellä esiintyneiden funktioiden lineaarikombinaatioina. Siten mielivaltaiselle korkeintaan kolmatta astetta olevalle polynomille p_3 pätee

$$\int_{-1}^{1} p_3(x)\,dx = p_3\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + p_3\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Kokeillaan

$$\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} (x^3 + 2x^2 + 1)\,dx = \\
&\Big|_{-1}^{1} \frac{x^4}{4} + \frac{2x^3}{3} + x = \\
&= \frac{1}{4} + \frac{2}{3} + 1 - \left(\frac{1}{4} - \frac{2}{3} - 1\right) \\
&= \frac{10}{3}.
\end{aligned}$$

Gaussin kahden pisteen kvadratuurilla:

$$\begin{aligned}
&\int_{-1}^{1} (x^3 + 2x^2 + 1)\,dx = \\
&= \frac{1}{3\sqrt{3}} + \frac{2}{3} + 1 + \left(\frac{-1}{3\sqrt{3}} + \frac{2}{3} + 1\right) \\
&= \frac{10}{3}.
\end{aligned}$$

Korkeampaa astetta oleville polynomeille saadaan vastaavat yhtälöt, joiden ratkaiseminen on työlästä. Pisteiden x_i ratkaiseminen suoraan yhtälöryhmistä ei ole kovin käytännöllistä. Siksi polynomit esitetäänkin ensin jonkin ortogonaalin kantafunktiojoukon avulla.

Jos pisteitä on n kappaletta, niiden paikat ovat Legendren polynomin $P_n(x)$ nollakohtia.

$$\begin{aligned}
P_0(x) &= 1, \\
P_1(x) &= x, \\
P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\
P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x), \\
&\vdots \\
(2n+1)P_n(x) &= (n+1)P_{n+1}(x) + nP_{n-1}(x).
\end{aligned}$$

Esim. kolmen pisteen menetelmän pisteet saadaan yhtälöstä $5x^3 - 3x = 0$, josta $x_1 = -\sqrt{3/5} = -0.7746$, $x_2 = 0$, $x_1 = \sqrt{3/5} = 0.7746$.

Näitä ei kannata ratkaista joka kerta uudestaan, vaan käytetään valmiiksi taulukoituja arvoja.

Pistettä x_i vastaava paino on

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P'(x_i)]^2}.$$

Polynomien derivaatat saadaan kaavoista

$$\begin{aligned}
P_0'(x) &= 0, \\
P_1'(x) &= 1, \\
P_2'(x) &= 3x, \\
P_3'(x) &= \frac{1}{2}(15x^2 - 3), \\
&\vdots \\
P_{n+1}'(x) &= P_{n-1}'(x) + (2n+1)P_n(x).
\end{aligned}$$

Mielivaltainen integroimisväli voidaan muuntaa väliksi [-1, 1] sijoituksella

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

$$dy = \frac{b-a}{2}\,dt,$$

jolloin integraali on

$$\int_a^b f(y)\,dy = \frac{b-a}{2}\sum w_i f(y_i),$$

missä

$$y_i = \left(\frac{b-a}{2}\right)x_i + \left(\frac{b+a}{2}\right),$$

Esimerkki:

$$\int_0^{\pi/2} \sin x\,dx$$

Lasketaan tämä Gaussin kolmen pisteen menetelmällä. Integroimisvälin muunnos on

$$y_i = \frac{\pi}{4}x_i + \frac{\pi}{4}.$$

Integraalin laskemiseen tarvitaan seuraavat suureet:

i	w_i	x_i	y_i	$w_i \sin y_i$
-1	0.5555555556	-0.7745966692	0.1770313620	0.0978378406
0	0.8888888889	0.0000000000	0.7853981634	0.6285393611
1	0.5555555556	0.7745966692	1.3937649648	0.5468726838
$\sum$				1.2732498855

Integraalin arvo on $(\pi/4)\times 1.2732498855 \approx 1.000008$. Integraalin tarkka arvo on 1. Kolmen pisteen integrointikaavalla saatiin tulos, jonka suhteellinen virhe on alle 10^{-5}.

n	x_i	w_i
2		
	0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
3		
	0.00000 00000 00000	0.88888 88888 88889
	0.77459 66692 41484	0.55555 55555 55556
4		
	0.33998 10435 84856	0.65214 51548 62546
	0.86113 63115 94053	0.34785 48451 37453
5		
	0.00000 00000 00000	0.56888 88888 88889
	0.53846 93101 05684	0.47862 86704 99366
	0.90617 98459 38664	0.23692 68850 56189
6	0.23861 91860 83197	0.46791 39345 72691
	0.66120 93864 66265	0.36076 15730 48138
	0.93246 95142 03152	0.17132 44923 79171
7		
	0.00000 00000 00000	0.41795 91836 73469
	0.40584 51513 77398	0.38183 00505 05118
	0.74153 11855 99395	0.27970 53914 89277
	0.94910 79123 42759	0.12948 49661 68868
8		
	0.18343 46424 95650	0.36268 37833 78362
	0.52553 24099 16329	0.31370 66458 77887
	0.79666 64774 13627	0.22238 10344 53375
	0.96028 98564 97536	0.10122 85362 90376
9		
	0.00000 00000 00000	0.33023 93550 01260
	0.32425 34234 03809	0.31234 70770 40003
	0.61337 14327 00590	0.26061 06964 02935
	0.83603 11073 26636	0.18064 81606 94857
	0.96816 02395 07626	0.08127 43883 61575

Useampiulotteiset integraalit

Voidaan laskea soveltamalla yksiulotteista integrointia erikseen kuhunkin dimensioon.

Esimerkiksi kaksiulotteinen integraali:

$$\begin{aligned}
&\int_a^b \int_c^d f(x, y)\, dx\, dy \\
&= \sum w_i \left(\int_c^d f(x_i, y)\, dy \right) \\
&= \sum w_i \sum w_j' f(x_i, y_j).
\end{aligned}$$

Painoista ja pisteistä riippuen menetelmä voi tässä olla Gauss tai jokin Newton-Cotes.

Kun dimensio suurempi kuin noin 5, kannattaa käyttää Monte Carlo -menetelmää.

Epäoleelliset integraalit

Esimerkiksi

$$\int_0^\infty f(x)\,dx.$$

Erilaisia mahdollisuuksia:

1) Tehdään muunnos $[0, \infty] \to [a, b]$.

2) Jatketaan yhä pitemmälle, kunnes tulos ei enää muutu.

3) Integroidaan paloittain. Funktiolla todennäköisesti "häntä", jossa arvot hyvin pieniä, joten voidaan käyttää pitkää askelta.

Monte Carlo -menetelmä

Integraalin

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx$$

suorakaidemenetelmällä laskettu arvo on

$$\sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(x_i)}{n}.$$

Tämä on funktion keskiarvo välillä [0,1]. Yleisessä tapauksessa integraali on funktion keskiarvo kerrottuna välin pituudella.

Periaatteessa sama tulos saadaan, jos integraali lasketaan satunnaisissa pisteissä t_i, jotka jakautuvat tasaisesti integrointivälille:

$$I' = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f(t_i)}{n}.$$

Tämä on satunnaismuuttuja, jonka odotusarvo on integraalin oikea arvo: $EI' = I$, Kun $N \to \infty$, $I' \to I$.

Jos on laskettava integraali

$$\int_A f\,dV$$

jonkin mutkikkaan alueen yli, lasketaan

$$\int_B g\,dV,$$

missä $A \subset B$ ja $g(x) = f(x)$, jos $x \in A$ ja 0 muuten. Integraalin likiarvo on

$$I = \sum g(x_i),$$

missä satunnaisluvut x_i ovat jakautuneet tasaisesti alueeseen B.

Esimerkiksi n-ulotteisen pallon tilavuuden laskeminen. Tuotetaan kuution sisälle tasaisesti jakautuneita pisteitä

$$\mathbf{r}_i = (X_1, X_2, ..., X_n).$$

Nyt $g(\mathbf{r}_i) = 1$, jos $|\mathbf{r}_i|$ on pienempi kuin pallon säde ja 0 muuten. Summa $\sum g(\mathbf{r}_i)$ lähenee pallon ja ympäröivän kuution tilavuuksien suhdetta.

Virhe on suuruusluokkaa $1/\sqrt{n}$. Laskentaa voidaan jatkaa tarpeen mukaan. Jos käytetään tavallista kiinteän laskentahilan menetelmää, koko homma on uusittava, jos tarkkuutta halutaan parantaa.

Tarkkuus paranee hitaasti, joten menetelmä ei sovellu kaikkiin tehtäviin.

Virhe ei riipu avaruuden dimensiosta, joten menetelmää kannattaa käyttää, kun on laskettava moniulotteisia integraaleja.

Havaintodatan integrointi

Jos tasavälinen aineisto, voidaan käyttää mitä tahansa Newton-Cotes -tyyppistä menetelmää.

Jos aineisto ei tasavälistä, korjataan menetelmiä niin, että askelpituus muuttuu; esimerkiksi puolisuunnikassääntö:

$$\int f(x)\,dx = \frac{1}{2}\Big((x_1 - x_0) f(x_0) + (x_2 - x_0) f(x_1) + \dots + (x_n - x_{n-2}) f(x_{n-1}) + (x_n - x_{n-1}) f(x_n) \Big).$$

Toinen mahdollisuus: sovitetaan aineistoon jokin funktio, jolloin voidaan käyttää mitä tahansa menetelmää tai laskea integraali analyyttisesti.

Jos aineisto saadaan esimerkiksi simuloinnista tai on muuten raskas lakea, mutta voidaan laskea mielivaltaiselle pisteelle, kannattaa käyttää Gaussin menetelmää.