

Numeerinen integrointi

Anne Åström

Matematiikan pro gradu

Jyväskylän yliopisto
Matematiikan ja tilastotieteen laitos
Kevät 2022

Tiivistelmä: A, Åström, *Numeerinen integrointi* (engl. *Numerical integration*), matematiikan pro gradu -tutkielma, 59 s., Jyväskylän yliopisto, Matematiikan ja tilastotieteen laitos, kevät 2022.

Tämän pro gradu -tutkielman tarkoituksena on syventää ja laajentaa lukion MAA12 kurssin numeerisen integroinnin teoriaa. Tutkielmassa käsitellään Newton-Cotesin integrointimenetelmä sekä Richardsonin ja Rombergin ekstrapolointimenetelmä. Menetelmiä käytetään yksi- ja kaksiulotteiseen integrointiin.

Numeerinen integroiminen on pinta-alan laskemista. Pinta-ala on funktion kuvaajan ja x -akselin väliin jäävä alue, joka rajoittuu integrointiväliin. Integroinnin määrittelyksi on valittu koulumatematiikassa yleisesti käytetty Bernhard Riemannin määrittely, koska siitä on luontevaa johtaa numeerisen integroinnin menetelmät.

Lukion kurssilla esitellyt puolisuunnikassääntö ja Simpsonin $1/3$ -sääntö ovat Newton-Cotesin numeerisia integrointikaavoja. Näiden integrointikaavojen johtamisessa on käytetty Lagrangen interpolaatiopolynomeja. Lagrangen interpolaatiokaavalla voidaan määrittää polynomi, joka kulkee valittujen pisteiden kautta. Pisteet voivat olla erillisiä tai ne voidaan valita kuvaajalta. Puolisuunnikassäännössä näitä pisteitä on kaksi, ja Simpsonin $1/3$ -säännössä on kolme pistettä. Pisteitä lisäämällä saadaan johdettua lisää tarkempia integrointikaavoja, kunhan pisteistö on tasavälinen.

Kun pisteitä on yli seitsemän, tulee kaavoihin negatiivisia kertoimia ja ne eivät ole käyttökelpoisia. Yleisimmin integrointiväli jaetaan osaväleihin, jotka integroidaan erikseen ja osavälien integraalit summataan yhteen. Näitä kaavoja kutsutaan yhdistetyiksi kaavoiksi. Tarkkuus paranee, kun osavälien määrä lisääntyy.

Kun integraalille ei voida laskea tarkkaa arvoa, on tärkeää tietää virheen suuruusluokka. Virheen arvioiminen on aina suurimman mahdollisen virheen eli maksimaalisen virheen laskemista. Jokaiselle Newton-Cotesin kaavalle voidaan laskea virhe, ja virheelle voidaan määrittellä asteluku. Asteluku on $\mathcal{O}h^n$, jossa h on välin pituus. Mitä suurempi asteluku on, sitä enemmän välinpituuden muutoksella on vaikutusta virheen suuruusluokkaan. Jos asteluku on $\mathcal{O}h^4$, niin välin pituuden muutos vaikuttaa virheeseen h^4 kertaisesti. Kun osavälejä lisätään, tarkkuus paranee tämän asteluvun rajoissa. Osavälien lisääminen ei paranna integraalin tarkkuutta kovinkaan nopeasti.

Euler-MacLauren summakaavalla voidaan puolisuunnikassäännön virhe kirjoittaa sarjana. Tästä sarjamuodosta saadaan johdettua rekursiokaava, jolla saadaan eliminoitua virhetermejä. Tätä h^2 virhetermin eliminointia kutsutaan Richardsonin ekstrapolaatioksi. Ekstrapolointimenetelmällä saadaan lisää tarkkuutta nopeammin, koska asteluku paranee kahdella jokaisella ekstrapolointi kerralla. Tässä menetelmässä ensin jaetaan integroitava väli osaväleihin $m = 2, 4, 8, 16, \dots$ ja lasketaan integraalit eri osaväleille puolisuunnikassäännöllä. Näistä arvoista rekursiokaavalla saadaan uudet tarkemmat arvot. Edelleen samalla tavalla voidaan ekstrapoloida näistä arvoista tarkempia arvoja rekursiokaavalla. Nämä saadut arvot kirjataan taulukkoon, josta voidaan helposti nähdä arvojen tarkentuminen. Tätä rekursiomenetelmää kutsutaan Rombergin menetelmäksi ja taulukkoa Rombergin tauluksi.

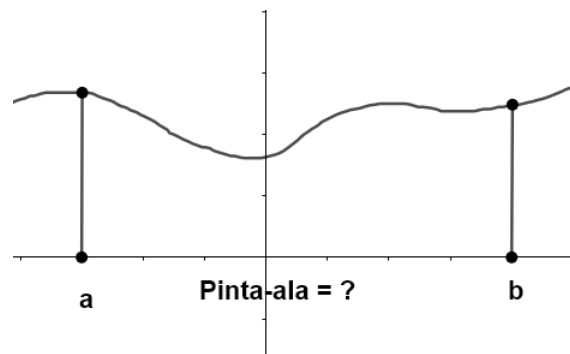
Sisällys

Johdanto	1
Luku 1. Integraalilaskennan taustatietoa	3
1.1. Riemannin integraali	3
Luku 2. Lagrangen interpolaatio	9
2.1. Lagrangen interpolaatiopolynomin virhe	14
Luku 3. Newton-Cotes kaavat	17
3.1. Puolisuunnikassääntö	18
3.2. Simpsonin 1/3-sääntö	22
3.3. Simpsonin 3/8-sääntö	27
3.4. Virheen arviointia	31
3.5. Puolisuunnikassäännön virhe	32
3.6. Simpsonin 1/3-säännön virhe	34
3.7. Simpsonin 3/8 -säännön virhe	35
3.8. Yhteenveto	36
Luku 4. Euler-Maclaurin summakaava	39
Luku 5. Ekstrapolointimenetelmä	43
Luku 6. Kaksiulotteisen integraalin laskeminen numeerisesti	49
6.1. Puolisuunnikassäännöllä	49
6.2. Yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä	50
6.3. Simpsonin 1/3-säännöllä	54
6.4. Yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä	55
Kirjallisuutta	59

Johdanto

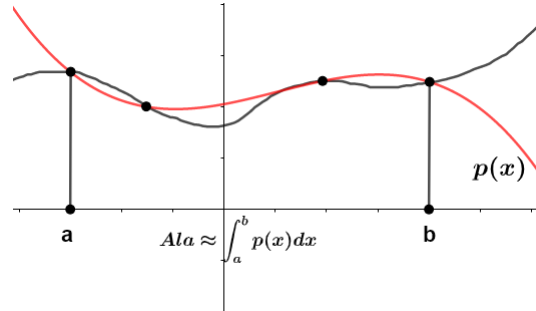
Kuinka määritetään pinta-ala x -akselin ja kuvaajan väliin jäävälle alueelle, joka rajoittuu välille $[a, b]$, kun integrointi alkeisfunktioiden avulla ei onnistu tai se on vaikeaa? Tämä klassinen ongelma voi tulla vastaan, kun kuvaaja on saatu mitaustuloksista tai jos funktio on esimerkiksi e^{x^2} , $\sin(x^2)$ tai $\cos(x^2)$. Kun määrättyä integraalia ei voida laskea eli pinta-alaa ei voida määrittää tarkasti, on numeerinen integrointi ratkaisu, jota käytetään laajasti tieteen ja tekniikan useilla alueilla. Vaikka analyyttisesti integroiminen on vaikeaa, niin numeerisesti se ei sitä ole.

Millaisilla numeerisilla menetelmillä pinta-ala voitaisiin laskea? Lukion MAA12 kurssilla, vuoden 2016 opetussuunnitelman mukaan, on esitelty muutamia numeerisia integrointikaavoja eli kvadratuureja. Tässä tutkielmassa esitellään nämä tutut kaavat yleisen integrointimenetelmän erikoistapauksina ja sitten syvennetään ja laajennetaan näiden kaavojen teoriaa. Lisäksi ekstrapoloidaan tarkempia arvoja sekä sovelletaan näitä menetelmiä kaksiulotteisessa integroinnissa. Vaikka numeerinen integrointi on yhteenlaskua, joka on virheitä tasoittava operaatio, on virheen tarkastelu olennainen osa numeerista integrointia. Jos ei pystytä laskemaan tarkkaa arvoa, on tiedettävä kuinka suuri virhe on tehty. Seuraavaksi esitellään tiivistetysti menetelmät, jotka tullaan käymään läpi tutkielmassa. Palataan siis ongelmaan: Kuinka x -akselin ja kuvaajan rajoittaman alueen pinta-ala voidaan laskea välillä $[a, b]$?

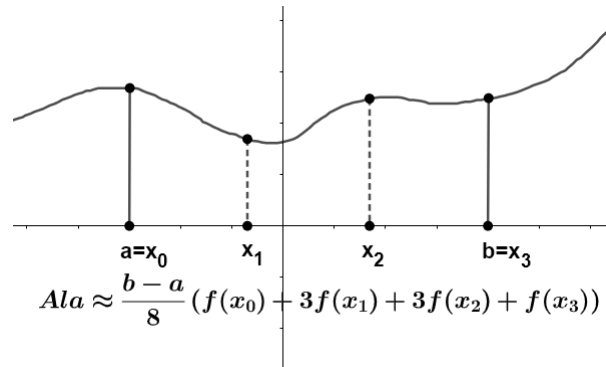


Aluksi on hyvä tietää, miten integraali määritellään? Tähän tutkielmaan sopiva määritelmä saadaan Bernhard Riemannilta, joka kehitti integroimisteorian. Riemannin määritelmää voidaan soveltaa jokaiselle rajoitetulle funktiolle suljetulla välillä. Määritelmässä arvioidaan eli approksimoidaan pinta-alaa suorakaiteilla, jotka rajoittuvat funktion kuvaajan ylä- ja alapuolelle. Näiden suorakaiteiden pinta-alat summataan yhteen ja saadaan ylä- ja alasumma, eli määritelmä on hyvin geometrinen. Riemannin määritelmä on hyvä lähtökohta, koska numeerinen integrointi pohjautuu tähän määritelmään.

Toki voitaisiin arvioida pinta-alaa näiden suorakaiteidenkin avulla. Tavoitteena on kuitenkin saada aikaan numeerisia integrointikaavoja, niin kannattanee lähteä ratkaisemaan ongelmaa toisin. Koska polynomien integroiminen ei ole vaikeaa, voitaisiinko siis kuvata helposti polynomilla?



Jos tämä piirretty käyrä olisi esitetty Lagrangelle, hän olisi ottanut muutaman pisteen käyrältä ja määrittänyt polynomien omalla kaavallaan. Lagrangen interpolaatiokaavalla voidaan helposti määrittää polynomi, joka kulkee haluttujen pisteiden kautta. Tarkkuuden lisääminen pisteitä lisäämällä ei kuitenkaan ole ongelmatonta.



Lagrangen interpolaatiokaavalla saaduista polynomeista Newton ja Cotes johtivat numeeriset integrointikaavat. Lukiosta tutut kaavat, puolisuunnikkasääntö ja Simpsonin sääntö, ovat juuri näitä kaavoja. Nämä kaavat toimivat vain, jos pisteistö on tasavälinen. Kun halutaan tarkkuutta lisää, käytetään yhdistettyjä kaavoja. Näissä integroimisväli $[a, b]$ jaetaan osaväleihin, jotka integroidaan erikseen. Näiden osavälien integraalit summataan yhteen. Newton-Cotesin kaavojen tarkkuus ei lisäänty kovin nopeasti, vaikka lisättäisiin pisteitä ja käytettäisiin yhdistettyjä kaavoja. Jos tarkkuutta halutaan nopeammin lisää, on etsittävä muita ratkaisuja.

Richardsonilta ja Rombergilta löytyy ekstrapolointimenetelmä, jolla voidaan laskea puolisuunnikkasäännöllä lasketuista likiarvoista uusia tarkempia arvoja. Näistä jo ekstrapoloiduista arvoista voidaan edelleen ekstrapoloida tarkempia arvoja. Kun arvot kirjataan Rombergin tauluun, nähdään kuinka arvot paranevat joka sarakkeessa. Tällä menetelmällä päästään nopeasti todella hyviin tarkkuuksiin.

Näitä menetelmiä tullaan soveltamaan tässä työssä myös kaksiulotteisessa integroinnissa.

LUKU 1

Integraalilaskennan taustatietoa

Antiikin Kreikan ja Arkimedeen ajoista asti on pohdittu, kuinka pinta-aloja saataisiin määritettyä tarkasti. Oli kuitenkin odotettava 1600-luvun lopulle asti, ennen kuin Newton ja Leibniz keksivät integraalifunktion ja määrätyn integraalin välisen yhteyden. Myöhemmin tätä integraalin määritelmää on tarkennettu useaan otteeseen. Nykyään integraalin käsitteitä on useita, kuten Riemannin, Lebesquen ja Bochnerin integraali. Koulumatematiikassa integraali määritellään yleensä Bernhard Riemannin 1800-luvulla esittämällä tavalla, jota sanotaan Riemannin integraaliksi. Se määrittelee integraalin geometrisesti ja on näin helpompi ymmärtää kuin esimerkiksi yleisempi mittateoriaan perustuva Lebesgue-integraali. Lisäksi on luontevaa johtaa numeerisen integraalin menetelmät Riemannin integraalin pohjalta, ja siksi se on valittu tähän työhön integraalin määritelmäksi. Seuraavassa määritellään integraali ylä- ja alasummien avulla, vaikka Rieman ei näitä käyttänyt integraalin määritelmässään vaan ylä- ja alasummia käytti Darboux. Tämä tapa on havainnollisempi ja helpompi ymmärtää, joten tämä esitystapa on yleistynyt myös Riemannin integraalin määritelmään vaikkei se siihen oikeasti kuulu.

1.1. Riemannin integraali

Olkoon f välillä a ja b määritelty funktio. Seuraavaksi on tavoitteena määritellä täsmällisesti mitä tarkoittaa integraali yli välin $[a, b]$. Merkitään tätä integraalia

$$S = \int_a^b f(x) dx.$$

Pisteiden a ja b väliin rajoitetun funktion ja x -akselin väliin jäävän alueen pinta-ala on S . Tälle rajoitetulle funktiolle määritellään seuraavaksi ylä- ja alaintegraali, jotka ovat keskeisiä käsitteitä Riemannin integraalin määrittelyssä. Funktiota, jolla ylä- ja alaintegraali saa saman arvon, kutsutaan Riemann-integroituvaksi. Lisäksi ylä- ja alaintegraalin arvoa kutsutaan Riemannin integraaliksi.

Jotta voimme määritellä ylä- ja alaintegraalin, on määriteltävä ylä- ja alasumma. Ensimmäinen kuitenkin tarvitaan jako suljetulle välille $[a, b]$, jotta voidaan määrittää ylä- ja alasumma.

MÄÄRITELMÄ 1.1. Joukko $P = \{x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n\}$ on välin $[a, b]$ jako, jos

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < x_3 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Tämän jaon ei tarvitse olla tasavälinen. Nyt voidaan väli $[a, b]$ jakaa osaväleihin $[x_0, x_1], [x_1, x_2], [x_2, x_3], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ ja $n \in \mathbb{N}$, jotka eivät ole päällekkäisiä.

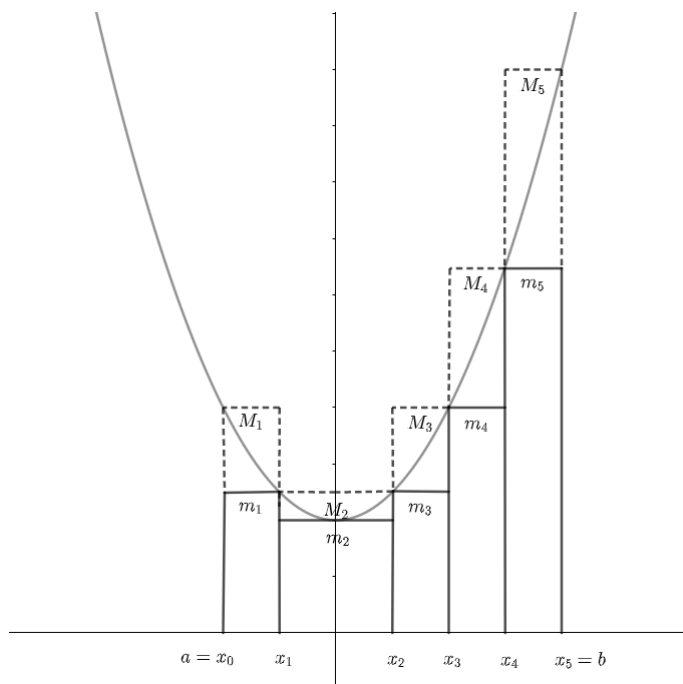
MÄÄRITELMÄ 1.2. (Ylä- ja alasummat eivät kuulu alkuperäiseen Riemannin integraalin määritelmään) Edellisen osituksen väleihin $[x_{k-1}, x_k]$, $k = 1, \dots, n$ määritellään

kaksi suorakaidetta. Toinen funktion kuvaajan yläpuolelle ja toinen alapuolelle, kuten kuvassa (1.1) on havainnollistettu. Yläpuolisen suorakaiteen korkeus M_k on funktion f supremum välillä $[x_{k-1}, x_k]$

$$M_k = \sup\{f(x) : x \in [x_{k-1}, x_k]\}$$

ja vastaavan välin alapuolisen suorakaiteen korkeus m_k on funktion f infimum välillä $[x_{k-1}, x_k]$

$$m_k = \inf\{f(x) : x \in [x_{k-1}, x_k]\}$$



KUVA 1.1. Ylä- ja alasummien määrittäminen.

Riemannin yläsumma: $S_Y(f; P)$ on näiden yläpuolisten suorakaiteiden pinta-alojen summa

$$S_Y(f; P) = M_1(x_1 - x_0) + M_2(x_2 - x_1) + \cdots + M_n(x_n - x_{n-1}) = \sum_{k=1}^n M_k(x_k - x_{k-1}).$$

Riemannin alasumma: $S_A(f; P)$ on näiden alapuolisten suorakaiteiden pinta-alojen summa

$$S_A(f; P) = m_1(x_1 - x_0) + m_2(x_2 - x_1) + \cdots + m_n(x_n - x_{n-1}) = \sum_{k=1}^n m_k(x_k - x_{k-1}).$$

HUOMAUTUS 1.3. Jos funktio f on jatkuva, niin sillä on jokaisella osavälillä suurin ja pienin arvo. Tällöin m_k on pienin arvo välillä $[x_{k-1}, x_k]$ ja M_k on suurin arvo välillä $[x_{k-1}, x_k]$.

Seuraavaksi määritellään ylä- ja alasummien joukko. Merkintä $P(I)$ tarkoittaa joukkoa, johon kuuluvat kaikki välin $I = [a, b]$ jaot. Jos funktio $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ on rajoitettu, niin jokaiselle jaolle $P \in P(I)$ on yläsumma $S_Y(f; P)$ ja alasumma $S_A(f; P)$. Näin muodostuu kaksi lukujoukkoa joukosta $P(I)$. Toinen on alasummien joukko, jota merkitään $\{S_A(f; P) | P \in P(I)\}$, ja toinen yläsummien joukko, jota merkitään $\{S_Y(f; P) | P \in P(I)\}$. Määritellään sitten ylä- ja alaintegraalit.

MÄÄRITELMÄ 1.4. Olkoon väli $I = [a, b]$ ja funktio $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ on rajoitettu. Välillä I funktion f **yläintegraali** on luku

$$S_Y(f) = \inf\{S_Y(f; P) | P \in P(I)\},$$

ja välillä I funktion f **alaintegraali** on luku

$$S_A(f) = \sup\{S_A(f; P) | P \in P(I)\}.$$

Siis yläintegraali on infimum kaikista yläsummien joukon alkioista ja vastaavasti alaintegraali on supremum kaikista alasummien joukon alkioista.

Jos $S_Y(f) = S_A(f)$, sanotaan funktion f olevan **Riemann-integroituva** välillä $[a, b]$. Ylä- ja alaintegraalin arvoa sanotaan funktion f **Riemannin integraaliksi** välillä $[a, b]$ eli

$$\int_a^b f(x) dx = S_Y(f) = S_A(f)$$

Seuraavassa esimerkissä määritetään yksinkertaiselle jatkuvalle funktiolle Riemannin integraali.

ESIMERKKI 1.1. Lasketaan funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = x^2$ Riemannin integraalin $\int_0^a x^2 dx$ arvo. Integroimisväli on $[0, a]$ ja jaetaan väli n osaväliin. Tehdään tasavälinen jako. Tällöin osavälin $[x_{k-1}, x_k]$ pituus on $\frac{a}{n}$. Välin jako on siis

$$P_n = \left\{0, \frac{a}{n}, \frac{2a}{n}, \dots, \frac{(n-1)a}{n}, a\right\}$$

Koska funktio on aidosti kasvava välillä $[0, a]$, on se aidosti kasvava myös jokaisella osavälillä $[x_{k-1}, x_k]$. Näillä väleillä funktion suurin arvo on funktion arvo välin päätepisteessä ja pienin arvo on funktion arvo välin alkupisteessä. Eli $M_k = f(x_k)$ ja $m_k = f(x_{k-1})$ välillä $[x_{k-1}, x_k]$.

Vastaavat korkeudet M_k ja m_k ovat siis

$$M_P = \left\{\left(\frac{a}{n}\right)^2, \left(\frac{2a}{n}\right)^2, \dots, \left(\frac{(n-1)a}{n}\right)^2, a^2\right\}$$

$$m_P = \left\{0, \left(\frac{a}{n}\right)^2, \left(\frac{2a}{n}\right)^2, \dots, \left(\frac{(n-1)a}{n}\right)^2\right\}$$

Seuraavassa laskussa käytetty nelisummakaava

$$(1.1) \quad \sum_{i=1}^n i^2 = 1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + n^2 = \left(\frac{n(n+1)(2n+1)}{6} \right)$$

Funktion f yläsumma on

$$\begin{aligned} S_Y(f; P_n) &= \frac{a}{n} \left(\left(\frac{a}{n} \right)^2 + \left(\frac{2a}{n} \right)^2 + \dots + \left(\frac{(n-1)a}{n} \right)^2 + a^2 \right) \\ &= \frac{a^3}{n^3} (1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + (n-1)^2 + n^2) \\ &= \frac{a^3}{n^3} \left(\frac{n(n+1)(2n-1)}{6} \right), \text{ käytetty kaavaa (1.1)} \\ &= \frac{a^3}{n^2} \left(\frac{3n^2 + 3n + 1}{6} \right) \\ &= a^3 \left(\frac{3n^2 + 3n + 1}{6n^2} \right) \\ &= a^3 \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{2n} + \frac{1}{6n^2} \right) \end{aligned}$$

Funktion f alasumma on

$$\begin{aligned} S_A(f; P_n) &= \frac{a}{n} \left(0^2 + \left(\frac{a}{n} \right)^2 + \left(\frac{2a}{n} \right)^2 + \dots + \left(\frac{(n-1)a}{n} \right)^2 \right) \\ &= \frac{a^3}{n^3} (1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + (n-1)^2) \\ &= \frac{a^3}{n^3} \left(\left(\frac{n(n+1)(2n-1)}{6} \right) - n^2 \right), \text{ käytetty kaavaa (1.1)} \\ &= \frac{a^3}{n^2} \left(\left(\frac{(n+1)(2n-1)}{6} \right) - n \right) \\ &= \frac{a^3}{n^2} \left(\frac{3n^2 - 3n + 1}{6} \right) \\ &= a^3 \left(\frac{3n^2 - 3n + 1}{6n^2} \right) \\ &= a^3 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n} + \frac{1}{6n^2} \right) \end{aligned}$$

Joukossa $\{S_Y(f; P_n)\}$ ei ole mukana kaikkia mahdollisia välin yläsummia, vaan siinä on tasavälisten jakojen yläsummat. Voimme kuitenkin arvioida yläintegraalia ylhäältä päin edellä laskettujen yläsummien avulla seuraavasti

$$S_Y(f) = \inf\{S_Y(f; P) \mid P \in P(I)\} \leq \inf\{S_Y(f; P_n)\}.$$

Yläsumman $S_Y(f; P_n)$ arvo pienenee, kun n kasvaa. Yläintegraalille saamme ar-
vion

$$S_Y(f) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} a^3 \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{2n} + \frac{1}{6n^2} \right) = \frac{1}{3}a^3.$$

Samalla tavalla voimme arvioida alaintegraalia alhaalta päin. Joukon $\{S_A(f; P_n)\}$
supremum on yhtä suuri tai pienempi kuin kaikkien välin alasummien supremum eli

$$S_A(f) = \sup\{S_A(f; P) \mid P \in P(I)\} \geq \sup\{S_Y(f; P_n)\}.$$

Alasummien $S_Y(f; P_n)$ arvo suurenee, kun n kasvaa. Alaintegraalille saamme ar-
vion

$$S_A(f) \geq \lim_{n \rightarrow \infty} a^3 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2n} + \frac{1}{6n^2} \right) = \frac{1}{3}a^3.$$

Kun yhdistetään edellä saadut arviot ala- ja yläintegraalien arvoista määritelmän
kanssa, saadaan seuraava päätelmä

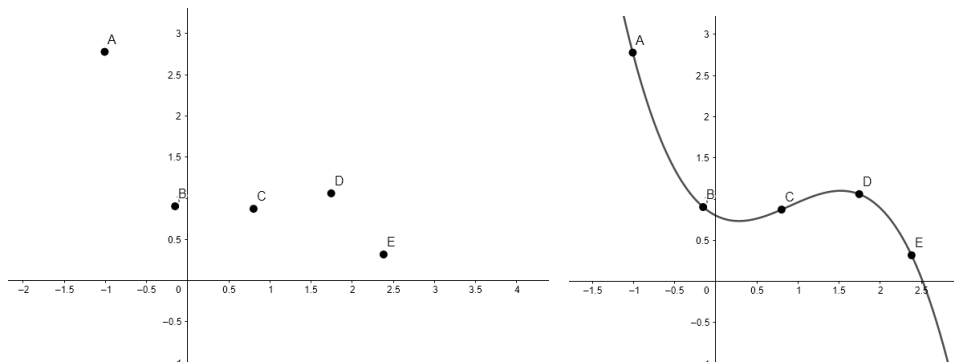
$$\frac{1}{3}a^3 \leq S_A(f) \leq S_Y(f) \leq \frac{1}{3}a^3.$$

Nyt funktion f ylä- ja alaintegraalit pitää olla samat. Koska ylä- ja alaintegraa-
lit ovat samat $S_Y(f) = S_A(f)$, niin määritelmän mukaan funktio f on Riemann-
integroituva ja Riemannin integraalin arvo on $\frac{1}{3}a^3$.

LUKU 2

Lagrange'n interpolaatio

Jos on vain datapisteitä kuten kuvassa (2.1) tai sitten vain koordinaatistoon piirretty käyrä kuten johdannossa, ei määrättyä integraalia voida laskea analyttisesti. Yksi ratkaisu on approksimoida polynomilla eli määrittää polynomi, joka kulkee datapisteiden tai käyrältä valittujen pisteiden kautta. Tämä polynomi voidaan määrittää ratkaisemalla pisteistä muodostettu yhtälöryhmä, mutta sen ratkaiseminen on työlästä. Seuraavaksi esitellään helpompi tapa tämän polynomin määrittämiseksi. Lagrange julkaisi interpolaatiopolynominsa vuonna 1795, ja sen avulla voidaan määrittää haluttujen pisteiden kautta kulkeva polynomi. Lagrange'n interpolaatiopolynomien avulla tullaan johtamaan numeerisia integrointikaavoja, koska polynomeja on helppo integroida.



KUVA 2.1. Vasemmassa kuvassa on datapisteet ja oikeassa Lagrange'n interpolaatiopolynomi, joka on sovitettu annettuun dataan.

ESIMERKKI 2.1. Johdatteluna Lagrange'n interpolaatioon, otetaan esimerkki peruskoulun matematiikasta. Otetaan kaksi pistettä (x_0, y_0) sekä (x_1, y_1) ja kirjoitetaan pisteiden kautta kulkevan suoran yhtälö. Saamme ensimmäisen asteen interpolaatiopolynomien p_1 , jota muokkaamalla saamme sille yleisemmän muodon.

$$\begin{aligned} p_1(x) &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\ &= y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \end{aligned}$$

Polynomi toteuttaa ehdon $p_1(x_0) = y_0$ ja $p_1(x_1) = y_1$, joka on tietysti ilmeistä. Kun merkitsemme ensimmäisen asteen polynomeja L_0 ja L_1 saamme interpolaatiopolynomien muotoon

$$\begin{aligned}
 p_1(x) &= y_0 \underbrace{\frac{x-x_1}{x_0-x_1}}_{L_0(x)} + y_1 \underbrace{\frac{x-x_0}{x_1-x_0}}_{L_1(x)} \\
 &= y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x)
 \end{aligned}$$

Kun $x = x_0$, niin $L_0(x_0) = 1$ ja $L_1(x_0) = 0$. Kun taas $x = x_1$, niin $L_0(x_1) = 0$ ja $L_1(x_1) = 1$. Yleisemmin siis $L_k(x_i) = 1$ kun $i = k$ ja $L_k(x_i) = 0$ kun $i \neq k$.

ESIMERKKI 2.2. Kokeillaan edellisen esimerkin mukaisesti toisen asteen polynomin määrittämistä. Otetaan kolme pistettä (x_0, y_0) , (x_1, y_1) sekä (x_2, y_2) ja edellisen esimerkin mukainen toisen asteen interpolaatiopolynomi p_2 on seuraava.

$$p_2(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + y_2 L_2(x)$$

Lisäksi seuraavien ehtojen pitää täytyä

$$\begin{aligned}
 p_2(x_0) &= y_0 \underbrace{L_0(x_0)}_1 + y_1 \underbrace{L_1(x_0)}_0 + y_2 \underbrace{L_2(x_0)}_0 = y_0 \\
 p_2(x_0) &= y_0 \underbrace{L_0(x_0)}_1 + y_1 \underbrace{L_1(x_0)}_0 + y_2 \underbrace{L_2(x_0)}_0 = y_0 \\
 p_2(x_2) &= y_0 \underbrace{L_0(x_2)}_0 + y_1 \underbrace{L_1(x_2)}_0 + y_2 \underbrace{L_2(x_2)}_1 = y_2
 \end{aligned}$$

Seuraavaksi pitäisi määrittää polynomit L_0 , L_1 ja L_2 . Määritetään ensin polynomi L_0 . Kun $L_0(x_1) = L_0(x_2) = 0$, on polynomin L_0 nollakohdat x_1 ja x_2 . L_0 on muotoa $c(x-x_1)(x-x_2)$. Lisäksi tarvitaan ehto $L_0(x_0) = 1$. Nyt saadaan yhtälö $c(x_0-x_1)(x_0-x_2) = 1$ ja ratkaistaan tästä c , niin saadaan $c = \frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$. Nyt L_0 on määritetty. Samalla tavalla voidaan määrittää L_1 ja L_2 .

$$\begin{aligned}
 L_0(x) &= \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \\
 L_1(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\
 L_2(x) &= \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.
 \end{aligned}$$

Pisteiden (x_0, y_0) , (x_1, y_1) ja (x_2, y_2) kautta kulkeva interpolaatiopolynomi p_2 saadaan kaavalla

$$p_2(x) = \sum_{k=0}^2 L_k(x)y_k = \sum_{k=0}^2 y_k \prod_{\substack{i=1 \\ k \neq i}}^2 \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Ollaan muodostettu edellisissä esimerkeissä (2.1) ja (2.2) interpolaatiopolynomi p_1 kahdelle pisteelle ja interpolaatiopolynomi p_2 kolmelle pisteelle. Seuraavaksi muodostetaan $n + 1$ pisteelle interpolaatiopolynomi p_n .

$$p_n(x) = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + y_2L_2(x) + \cdots + y_nL_n(x)$$

MÄÄRITELMÄ 2.1. (Lagrangein interpolaatiokaava pisteille) Olkoon $n \in \mathbb{N}$. Pisteiden $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ kautta kulkeva Lagrangein interpolaatiopolynomi p_n on

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)y_k = \sum_{k=0}^n y_k \prod_{\substack{i=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Kokonaislukua $k, 0 \leq k \leq n$ vastaavalle polynomille L_k on n kappaletta nollakoh-
tia $x_i, i = 0, 1, \dots, n, i \neq k$ eli $L_k(x_i) = 0$ kun $k \neq i$

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n C_k(x - x_i)$$

Vakion $C_k \in \mathbb{R}$ määrittämiseksi käytetään ehtoa $L_k(x_k) = 1$ ja saadaan

$$\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n C_k(x_k - x_i) = 1 \Rightarrow C_k = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{1}{(x_k - x_i)}$$

Kun C_k sijoitetaan edelliseen yhtälöön, niin saadaan **yleinen kaava Lagrangein kantafunktiolle**

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i} = \frac{x - x_0}{x_k - x_0} \cdots \frac{x - x_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} \cdots \frac{x - x_n}{x_k - x_n}$$

Polynomit L_k ovat ensimmäisen asteen polynomien tuloja, ja siksi korkeintaan astetta n . Interpolaatiopolynomi $p_n = y_0L_0(x) + y_1L_1(x) + y_2L_2(x) + \dots + y_nL_n(x)$ muodostuu polynomien $L_k \in P_n$ lineaarikombinaationa, ja siksi interpolaatiopolynomi $p_n \in P_n$ on korkeintaan n astetta. Määritelmästä saadaan triviaalisti $p_n(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Seuraavassa lauseessa todistetaan vielä yksikäsitteisyys polynomille p_n .

LAUSE 2.2. *Olkoon $n \geq 0$ ja $i = 1, 2, \dots, n$ lisäksi y_i ja $x_i \in \mathbb{R}$. Tällöin on olemassa yksikäsitteinen polynomi $p_n \in P_n$ siten, että*

$$p_n(x_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, n$$

Todistus. Kun $n = 0$ väite on triviaalisti totta. Kun $n \geq 1$ määritelmän mukaan Lagrangen interpolaatiopolynomi $p_n \in P_n$ löytyy seuraavasti

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)y_k$$

ja se on lauseen mukainen. Otetaan ehdot täyttävä polynomi $q_n \in P_n$. Koska n asteisella polynomilla ei voi olla kuin n erillistä nollakohtaa ellei se ole identtisesti 0, niin

$$p_n(x) - q_n(x) \equiv 0,$$

Tästä seuraa, että muita polynomeja ei ole ja polynomi $p_n \in P_n$ on yksikäsitteisesti määritelty. \square

MÄÄRITELMÄ 2.3. (Lagrangen interpolaatiokaava funktiolle) Olkoon $n \geq 0$. Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ pisteiden $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)) \dots, (x_n, f(x_n))$ kautta kulkeva astetta n oleva Lagrangen interpolaatiopolynomi p_n on

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)f(x_k) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \prod_{\substack{i=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

ESIMERKKI 2.3. Lasketaan funktiolle $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2$ Lagrangen interpolaatiopolynomi. Otetaan ensin kolme pistettä $x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 2$, ja sitten neljä pistettä $x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 2, x_3 = 3$.

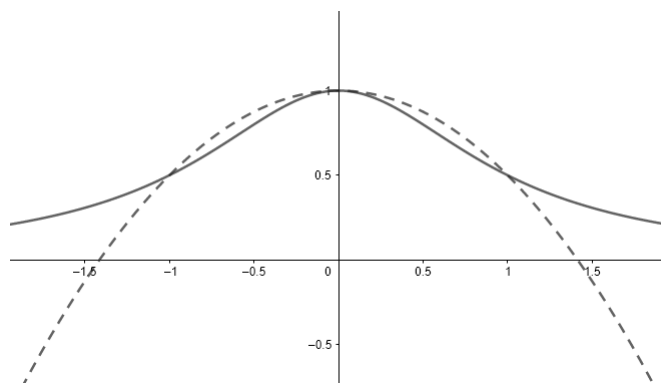
$$\begin{aligned} p_2(x) &= L_0(x)f(0) + L_1(x)f(1) + L_2(x)f(2) \\ &= \frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)}0^2 + \frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)}1^2 + \frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)}2^2 \\ &= 0 + (x^2 - 2x)(-1) + (x^2 - x)\frac{1}{2}4 \\ &= -x^2 + 2x + 2x^2 - 2x = x^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_3(x) &= L_0(x)f(0) + L_1(x)f(1) + L_2(x)f(2) + L_3(x)f(3) \\
&= \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)}0^2 + \frac{(x-0)(x-2)(x-3)}{(1-0)(1-2)(1-3)}1^2 \\
&\quad + \frac{(x-0)(x-1)(x-3)}{(2-0)(2-1)(2-3)}2^2 + \frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(3-0)(3-1)(3-2)}3^2 \\
&= 0 + (x^2 - 5x + 6)\frac{x}{2} + (x^2 - 4x + 3)\left(\frac{-x}{2}\right)4 + (x^2 - 3x + 2)\frac{9x}{6} \\
&= (x^2 - 5x + 6 - 4x^2 + 16x - 12 + 3x^2 - 9x + 6)\frac{x}{2} = x^2
\end{aligned}$$

Alkuperäinen funktio oli toista astetta, joten saimme molemmista Lagrangen polynomeista tarkan arvon. Lagrangen polynomi p_n antaa funktiolle tarkan arvon, jos funktio on korkeintaan n astetta. Lisäksi voi huomioida, että jos datapisteitä lisätään, on Lagrangen interpolaatiopolynomi laskettava aina uudestaan. Jos datapisteitä on paljon, on polynomin laskeminen työlästä.

ESIMERKKI 2.4. Lasketaan funktiolle $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ toisen asteen Lagrangen interpolaatiopolynomi, joka kulkee pisteiden $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ kautta.

$$\begin{aligned}
p_2(x) &= L_0(x)f(-1) + L_1(x)f(0) + L_2(x)f(1) \\
&= \frac{(x-0)(x-1)}{(-1-0)(-1-1)}\frac{1}{2} + \frac{(x+1)(x-1)}{(0+1)(0-1)}1 + \frac{(x+1)(x-0)}{(1+1)(1-0)}\frac{1}{2} \\
&= (x^2 - x)\frac{1}{4} - (x^2 - 1) + (x^2 + x)\frac{1}{4} = -\frac{1}{2}x^2 + 1
\end{aligned}$$



KUVA 2.2. Funktio $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ ja sille laskettu toisen asteen Lagrangen interpolaatiopolynomi, joka kulkee pisteiden $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ kautta(katkoviiva).

2.1. Lagrangen interpolaatiopolynomin virhe

Interpolointipisteissä funktion f ja interpolaatiopolynomin p_n arvot ovat tietysti samat, mutta muualla funktio ja interpolaatiopolynomi voivat saada hyvinkin erilaisia arvoja. Kuinka paljon ne eroavat? Virheen arviointi on pahimman mahdollisen eli maksimaallisen virheen laskemista. Virhe on aina positiivinen luku, ja sen takia virheen kaavassa on itseisarvomerkit. Oletetaan, että funktio f on riittävän sileä. Lagrangen interpolointivirhe on $f(x) - p_n(x)$, ja sille esitetään lauseke sekä arvio seuraavassa lauseessa.

LAUSE 2.4. *Olkoon $n \in \mathbb{N}$ sekä f määritelty reaaliarvoinen funktio, joka on jatkuva suljetulla välillä $[a, b]$ siten, että $f^{(n+1)}$ derivaatta on olemassa ja se on jatkuva välillä $[a, b]$. Tällöin jokaiselle $x \in [a, b]$, on olemassa $\xi = \xi(x) \in (a, b)$ siten, että*

$$(2.1) \quad f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i).$$

Erityisesti $x \in [a, b]$ pätee

$$(2.2) \quad |f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right|,$$

missä

$$M_{(n+1)} = \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(n+1)}(\xi)|.$$

Huomioitavaa virheen kaavassa on, että ξ on tuntematon ja riippuu x arvosta. Virheen arvioimiseksi yleensä lasketaan ensin derivaatta $f^{(n+1)}$ ja sitten arvioidaan tai lasketaan milloin se saa suurimman arvonsa.

Todistus. Kun $x = x_i$, jollekin i , $i = 0, 1, \dots, n$, on yhtälö(2.1) molemmilta puolilta nolla ja yhtälö triviaalisti totta. Olkoon funktio

$$F(x) := f(x) - p_n(x) - K(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

ja K vakio, joka valitaan myöhemmin.

Olkoon mielivaltainen piste $t \in [a, b]$ ja $t \neq x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$. Nyt on olemassa vakio K siten, että funktiolla F on nollakohta pisteessä t eli $F(t) = 0$ ja selvästi $F(x_i) = 0$, $i = 0, 1, \dots, n$. Funktiolla F on $n+2$ nollakohtaa välillä $[a, b]$ ja derivaatalla F' on ainakin $n+1$ nollakohtaa. Tässä on käytetty Rollen lausetta toistuvasti, jonka mukaan funktiolla on kahden nollakohdan välillä ainakin yksi derivaatan nollakohta. Erityisesti derivaatalla $F^{(n+1)}$ on ainakin yksi nollakohta $\xi = \xi(x)$. Koska n asteen polynomin derivaatta $p_n^{(n+1)} = 0$, niin

$$F^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - K(n+1)! = 0$$

ja tästä saadaan

$$K = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}$$

Kun sijoitamme K :n arvon funktioon $F(x)$ saamme

$$f(t) - p_n(t) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (t - x_0)(t - x_1) \dots (t - x_n),$$

koska oletuksen mukaan $F(t) = 0$ \square

ESIMERKKI 2.5. Lasketaan virhe edellisessä esimerkissä (2.4) lasketulle Lagrangen interpolaatiopolynomille $p_2(x) = -\frac{1}{2}x^2 + 1$ välillä $[-1, 1]$. Lasketaan ensin alkuperäisen funktion $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ kolmas derivaatta

$$f^3 = \frac{-16x^7 + 31x^4 + 19x^3 + 8x^2 + 7x - 1}{(1+x^2)^4}.$$

Suurimman arvonsa se saa interpolaatiovälillä pisteessä $x = 1$ ja $f^3(1) = 3$. Virheen arvioimiseen saadaan seuraava esitys

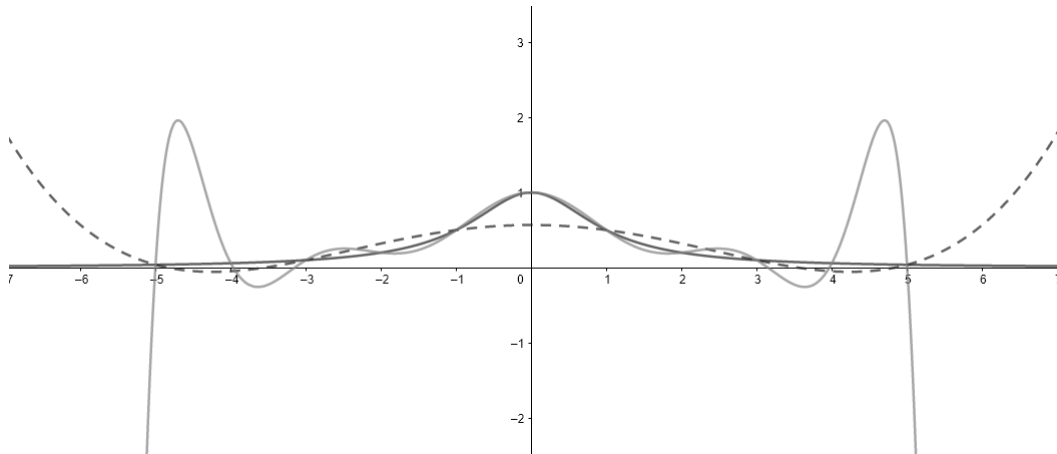
$$|f(x) - p_2(x)| \leq \frac{3}{6} |(x+1)(x-0)(x-1)| = \frac{1}{2} |x(x^2 - 1)|.$$

Esimerkiksi pisteessä $x = \frac{1}{2}$ saadaan virheen ylärajaksi

$$\frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \left[\left(\frac{1}{2} \right)^2 - 1 \right] \right| = 0,1875.$$

Kuvasta (2.2) katsomalla virheen arvio kohdassa $\frac{1}{2}$ näyttäisi oleva kohtalaisen hyvä. Todellinen virhe on 0,075 eli yli kaksi kertaa pienempi, mutta virheen laskeminen on aina arvio ja aina se on suurempi tai yhtä suuri kuin oikea virhe.

Voisi luulla, että interpolaatiopisteitä lisäämällä voitaisiin saada lisää tarkkuutta. Seuraavassa kuvassa (2.3) nähdään, kuinka pisteiden lisääminen saa interpolaatiopolynomien heilahtelemaan. Tämä heilahteluilmiö tunnetaan Runge'n ilmiönä.



KUVA 2.3. Interpolaatiopolynomit funktiolle $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = \frac{1}{1+x^2}$. Viidennen asteen p_5 (katkoviiva) ja kymmenennen asteen p_{10} (harmaa viiva) Lagrangen interpolaatiopolynomit välillä $x \in [-5,5]$.

LUKU 3

Newton-Cotes kaavat

Tässä luvussa tutustutaan Newtonin ja Cotesin numeerisiin integrointikaavoihin. Nämä kaavat ovat hyvin käyttökelpoisia edelleen esimerkiksi laskimissa. Cotes eli 1782-1816 ja työskenteli tiiviisti Newtonin kanssa. Cotes ehti julkaista vain yhden tieteellisen artikkelin nimeltä Logometria, vaikka kehitti eteenpäin matematiikkaa monellakin osa-alueella. Newtonin ja Cotesin yhteistyön tuloksena saatiin kaavat, joilla voidaan laskea integraaleja numeerisesti tilanteissa, joissa ei ole mahdollista tai mielekäästä laskea tarkkoja arvoja. Newton-Cotesin kaavojen johtamisessa käytetään Lagrangen kehittämää polynomien interpolaatiota, joka esiteltiin edellisessä luvussa tarkemmin. Käsiteltävät kaavat ovat puolisuunnikkasääntö ja Simpsonin 1/3- sekä 3/8-sääntö. Kaavoja voidaan johtaa enemmänkin, mutta tarkkuutta nämä kaavat eivät välttämättä tuo lisää, kuten tullaan huomaamaan virheen arviontia käsittelevässä kappaleessa.

Olkoon $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ jatkuva välillä $[a, b]$. Funktion määrätty integraali on

$$\int_a^b f(x) dx.$$

Integraalille saadaan arvio, kun funktiota f approksimoidaan ensin Lagrangen interpolaatiopolynomilla p_n ja integroidaan tämä polynomi.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_n(x) dx$$

Tarkastellaan suljettua väliä $[a, b]$ ja sen tasavälistä jakoa, jonka interpolaatiopisteet merkitään seuraavasti

$$x_i = a + ih, \text{ missä } i = 0, 1, \dots, n$$

ja välin pituus h on

$$h = \frac{b-a}{n}, \text{ missä } n \in \mathbb{N}.$$

Funktiolle $f(x)$ Lagrangen interpolaatiopolynomi, jonka asteluku on n saadaan edellisiä jakopisteitä käyttäen seuraavasti

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n L_k(x)f(x_k), \text{ missä } L_k(x) = \prod_{\substack{i=1 \\ k \neq i}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Seuraavaksi integroidaan saatu Lagrangen interpolaatiopolynomi

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_n(x) dx = \int_a^b \sum_{k=0}^n L_k(x)f(x_k) dx = \sum_{k=0}^n f(x_k) \underbrace{\int_a^b L_k(x) dx}_{w_k}$$

Seuraavaa numeerista integrointikaava kutsutaan n asteen Newton-Cotesin kaavaksi, missä x_k , $k = 1, 2, \dots, n$ ovat integrointipisteitä ja w_k ovat pisteisiin x_k liittyvät painokertoimet.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n w_k f(x_k), k = 1, 2, 3, \dots, n$$

Seuraavaksi sovelletaan tätä yleistä kaavaa tapauksissa $n = 1, 2, 3$.

3.1. Puolisuunnikassääntö

Kun $n = 1$, niin silloin $x_0 = a$ ja $x_1 = b$. Lagrangen ensimmäistä astetta oleva interpolaatiopolynomi funktiolle f on

$$\begin{aligned} p_1(x) &= L_0(x)f(a) + L_1(x)f(b) \\ &= \frac{x-b}{a-b}f(a) + \frac{x-a}{b-a}f(b) \\ &= \frac{1}{b-a} [(b-x)f(a) + (x-a)f(b)]. \end{aligned}$$

Integroimalla $p_1(x)$ saadaan

$$\begin{aligned}
\int_a^b p_1(x) dx &= \frac{1}{b-a} \int_a^b [(b-x)f(a) + (x-a)f(b)] dx \\
&= \frac{1}{b-a} \left[\int_a^b (b-x)f(a) dx + \int_a^b (x-a)f(b) dx \right] \\
&= \frac{1}{b-a} \left[f(a) \int_a^b (b-x) dx + f(b) \int_a^b (x-a) dx \right] \\
&= \frac{1}{b-a} \left[f(a) \left(bx - \frac{1}{2}x^2 \right) \Big|_a^b + f(b) \left(\frac{1}{2}x^2 - ax \right) \Big|_a^b \right] \\
&= \frac{1}{b-a} \left[\frac{1}{2}f(a)(b-a)^2 + \frac{1}{2}f(b)(b-a)^2 \right] \\
&= \frac{(b-a)(b-a)}{2(b-a)} [f(a) + f(b)]
\end{aligned}$$

Näin ollen saadaan

$$\int_a^b p_1(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

Näin saatiin numeerinen integrointikaava, jota kutsutaan **puolisuunnikassäännök-
si**, joka on hyvin käyttökelpoinen erityisesti jaksollisten funktioiden integraalien las-
kemisessä. Se muistuttaa puolisuunnikkaan pinta-alan laskukaavaa.

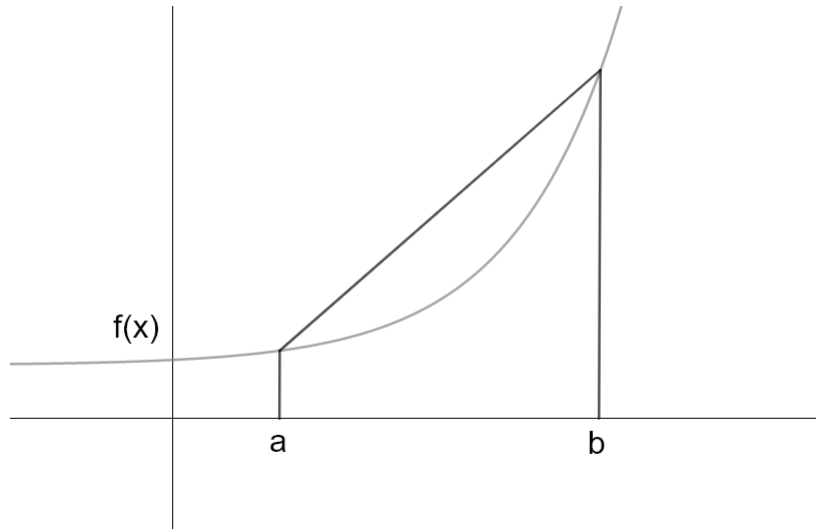
$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

ESIMERKKI 3.1. Lasketaan funktion

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

integraalille välillä $[0,3]$ approksimaatio puolisuunnikassäännön avulla. Funktion ar-
vot välin päätepisteissä ovat $f(0) = 6$ ja $f(3) = 9879$ ja tarkka arvo funktion f
integraalille on 5 244,75.

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x) dx &\approx \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] \\
&= \frac{3-0}{2} [f(0) + f(3)] \\
&= \frac{3}{2} [6 + 9879] \\
&= 14\,827,5
\end{aligned}$$



KUVA 3.1. Positiivisen funktion $f(x)$ määrätty integraali välillä $[a, b]$ puolisuunnikassäännöllä laskee puolisuunnikkaan muotoisen alueen pinta-alan. Kaavalla voidaan laskea myös vaihtuvamerkkisten funktioiden numeerisia integraaleja.

Tarkkaa arvoa ja puolisuunnikassäännön avulla laskettua arvoa vertaamalla saadaan laskettua virhe.

$$|5\,244,75 - 14\,827,5| = 9\,582,75$$

$$\frac{14\,827,5 - 5\,244,75}{14\,827,5} \cdot 100\% \approx 64,628\%$$

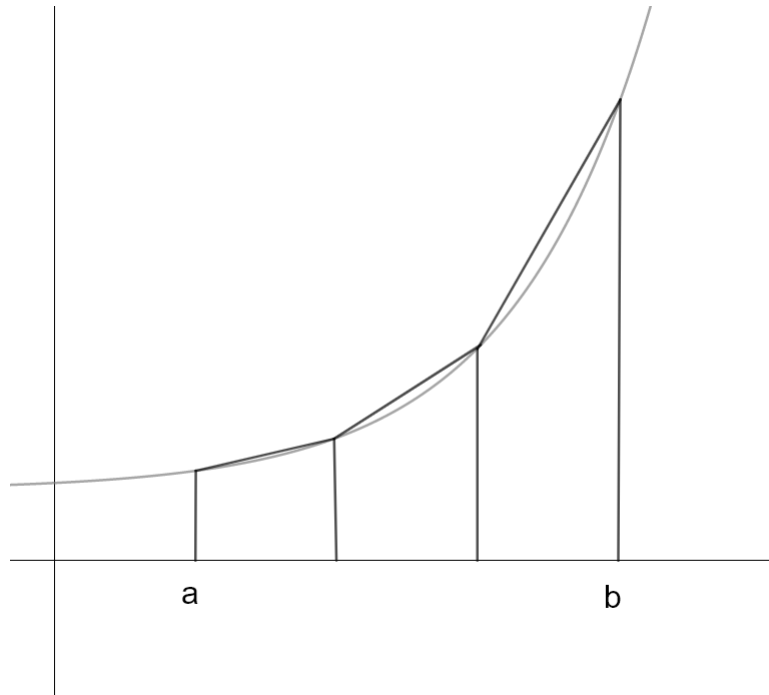
Virhe on suhteellisen suuri, joten approksimaatio ei ollut oikein hyvä. Väli on liian pitkä. Approksimaatiota saadaan parannettua, kun pienennetään väliä. Jaetaan väli useampaan osaan ja käytetään näille väleille puolisuunnikassääntöä ja summataan saadut arvot yhteen.

Seuraavaksi esitellään **puolisuunnikassäännölle yhdistetty kaava**, jolla saadaan tarkempi approksimaatio integraalille

$$\int_a^b f(x) dx.$$

Integrointiväli $[a, b]$ jaetaan useaan väliin $i = 0, 1, 2, \dots, m$ ja jako on tasavälinen. Välit ovat

$$[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{m-2}, x_{m-1}], [x_{m-1}, x_m].$$



KUVA 3.2. Funktion $f(x)$ määrätty integraali välillä $[a, b]$ yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä laskee usean puolisuunnikkaan muotoisen alueen pinta-alan yhteen.

Näihin väleihin sovelletaan puolisuunnikassääntöä erikseen ja väleille saadut approksimaatiot summataan yhteen. Välin pituus on $h = (b - a)/m$

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{m-2}}^{x_{m-1}} f(x) dx + \int_{x_{m-1}}^{x_m} f(x) dx \\
 &\approx \frac{x_1 - x_0}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{x_2 - x_1}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \dots \\
 &\quad + \frac{x_{m-2} - x_{m-1}}{2} [f(x_{m-1}) + f(x_{m-2})] + \frac{x_m - x_{m-1}}{2} [f(x_{m-1}) + f(x_m)] \\
 &= \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \dots \\
 &\quad + \frac{h}{2} [f(x_{m-2}) + f(x_{m-1})] + \frac{h}{2} [f(x_{m-1}) + f(x_m)]
 \end{aligned}$$

Näin saatiin kaava **yhdistetty puolisuunnikassääntö**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)]$$

ESIMERKKI 3.2. Jatketaan edellistä esimerkkiä ja käytetään samaa funktiota

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6.$$

Lasketaan funktion integraali välillä $[0, 3]$ yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä. Välin osavälit ovat $[0, 1]$, $[1, 2]$ ja $[2, 3]$. Näille väleille sovelletaan puolisuunnikassääntöä. Funktion arvot välien päätepisteissä ovat $f(0) = 6$, $f(1) = 75$, $f(2) = 1496$ ja $f(3) = 9879$.

$$\begin{aligned} \int_0^3 f(x) dx &= \int_0^1 f(x) dx + \int_1^2 f(x) dx + \int_2^3 f(x) dx \\ &\approx \frac{1-0}{2} [f(0) + f(1)] + \frac{2-1}{2} [f(1) + f(2)] + \frac{3-2}{2} [f(2) + f(3)] \\ &= \frac{1}{2} [f(0) + f(1)] + \frac{1}{2} [f(1) + f(2)] + \frac{1}{2} [f(2) + f(3)] \\ &= \frac{1}{2} [f(0) + 2f(1) + 2f(2) + f(3)] \\ &= \frac{1}{2} (6 + 2 \cdot 75 + 2 \cdot 1496 + 9879) \\ &= \frac{13027}{2} \end{aligned}$$

Tarkkaa arvoa ja yhdistetyn puolisuunnikassäännön avulla laskettua arvoa vertaamalla saadaan laskettua virhe.

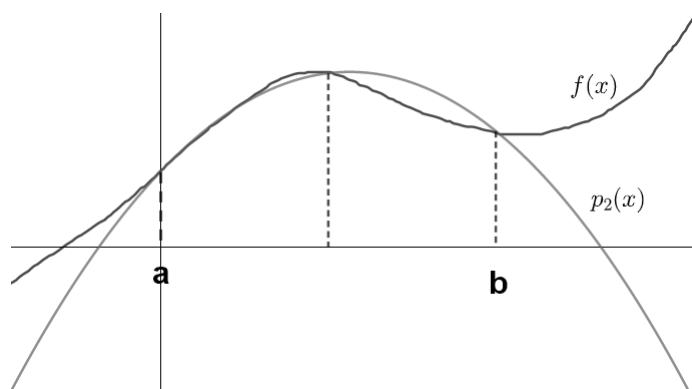
$$6\,513,5 - 5\,244,75 = 1268,75$$

$$\frac{6\,513,5 - 5\,244,75}{5\,244,75} \cdot 100\% \approx 24,191\%$$

Nyt virhe pieneni kahdeksanteen osaan edellisestä esimerkistä, jossa virhe oli 9 582,75.

3.2. Simpsonin 1/3-sääntö

On tilanteita, joissa numeerisen integraalin laskeminen puolisuunnikassäännöllä ei tuo riittävää tarkuutta. Pisteistö tai funktio voi olla sellainen, että kahden interpolointipisteen sijaan kannattaa ottaa kolme pistettä. Tällöin ei approksimoida funktiota suoralla vaan toisen asteen polynomilla. Johdetaan seuraavaksi numeerinen integrointikaava, jota kutsutaan Simpsonin 1/3-säännöksi. Nimitys tulee matemaatikko Thomas Simpsonin mukaan, mutta mistä tulee nimitys 1/3-sääntö? Se selviää, kun saadaan kaava johdettua.



KUVA 3.3. Laskettaessa funktion $f(x)$ määrätty integraali välillä $[a, b]$ Simpsonin 1/3-säännöllä integroidaan Lagrangen interpolaatiopolynomi $p_2(x)$, joka kulkee kolmen funktion f pisteen kautta.

Kun $n = 2$, niin silloin interpolointipisteet ovat $x_0 = a$, $x_1 = (b - a)/2$ ja $x_2 = b$. Lagrangen toista-astetta oleva interpolaatiopolynomi funktiolle f on

$$p_2(x) = \underbrace{\frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}}_{L_0(x)} f(x_0) + \underbrace{\frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}}_{L_1(x)} f(x_1) + \underbrace{\frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}}_{L_2(x)} f(x_2).$$

Integroidaan interpolaatiopolynomi

$$\int_a^b p_2(x) dx = f(x_0) \int_a^b L_0(x) dx + f(x_1) \int_a^b L_1(x) dx + f(x_2) \int_a^b L_2(x) dx$$

Lasketaan integraali $L_0(x)$ tekemällä muuttujan vaihto $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$, $dx = \frac{b-a}{2}dt$, $x_0 = -1$, $x_1 = 0$ ja $x_2 = 1$

$$\begin{aligned} \int_a^b L_0(x) dx &= \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} dx \\ &= \int_{-1}^1 \frac{(t - 0)(t - 1)}{(-1 - 0)(-1 - 1)} \frac{b - a}{2} dt \\ &= \int_{-1}^1 \frac{t^2 - t}{2} \frac{b - a}{2} dt \\ &= \frac{b - a}{4} \left(\frac{1}{3}t^3 - \frac{1}{2}t^2 \right) \Big|_{-1}^1 \\ &= \frac{b - a}{4} \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right) \right) \\ &= \frac{b - a}{2} \frac{1}{3} \end{aligned}$$

Lasketaan integraali $L_1(x)$ samanlaisella muuttujan vaihdolla

$$\begin{aligned}
\int_a^b L_1(x) dx &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} dx \\
&= \int_{-1}^1 \frac{(t+1)(t-1)}{(0+1)(0-1)} \frac{b-a}{2} dt \\
&= \int_{-1}^1 \frac{t^2+1}{-2} \frac{b-a}{2} dt \\
&= \frac{b-a}{4} \left(-\frac{1}{3}t^3 - t \right) \Big|_{-1}^1 \\
&= \frac{(b-a)}{2} \frac{4}{3}
\end{aligned}$$

Samalla tavoin saadaan laskettua integraali $L_2(x)$.

$$\begin{aligned}
\int_a^b L_2(x) dx &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} dx \\
&= \frac{b-a}{2} \frac{1}{3}
\end{aligned}$$

Sijoitetaan integrointien tulokset kaavaan

$$\int_a^b p_2(x) dx = f(x_0) \underbrace{\int_a^b L_0(x) dx}_{\frac{b-a}{2} \frac{1}{3}} + f(x_1) \underbrace{\int_a^b L_1(x) dx}_{\frac{(b-a)}{2} \frac{4}{3}} + f(x_2) \underbrace{\int_a^b L_2(x) dx}_{\frac{b-a}{2} \frac{1}{3}}.$$

Näin saatiin numeerinen integrointikaava, jota kutsutaan **Simpsonin 1/3-säännöksi**. Tässä kaavassa funktiota f approksimoidaan toisen asteen polynomilla. Nimitys 1/3 tulee kertoimesta kaavassa ja nimi taas matemaatikko Thomas Simpsonin mukaan.

$$\int_a^b p_2(x) dx = \underbrace{\frac{b-a}{2}}_h \frac{1}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \approx \int_a^b f(x) dx$$

ESIMERKKI 3.3. Jatketaan edellisiä esimerkkejä ja käytetään samaa funktiota

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6,$$

kun lasketaan integraalille välillä $[0,3]$ approksimaatio Simpsonin 1/3-säännön avulla. Funktion arvot integrointipisteissä ovat $f(0) = 6$, $f(1,5) = 409,3125$ ja $f(3) = 9879$ sekä tarkka arvo funktion f integraalille on 5244,75.

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x) dx &\approx \underbrace{\frac{b-a}{2}}_h \frac{1}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \\
&= \frac{3-0}{2} \frac{1}{3} [f(0) + f(1,5) + f(3)] \\
&= \frac{1}{2} [6 + 1637,25 + 9879] \\
&= 5761,125
\end{aligned}$$

Tarkkaa arvoa ja Simpsonin 1/3-säännön avulla laskettua arvoa vertaamalla saadaan virheeksi

$$5761,125 - 5244,75 = 516,37$$

$$\frac{5761,125 - 5244,75}{5244,75} \cdot 100\% \approx 9,84\%.$$

Virhe oli edellisessä esimerkissä 1268,75 ja nyt se oli puolet pienempi vaikka molemmissa esimerkeissä käytettiin kolmea integrointipistettä. Tässä tapauksessa Simpsonin 1/3-sääntö oli yhdistettyä puolisuunnikkasääntöä tarkempi.

Seuraavaksi esitellään **Simpsonin 1/3-säännölle yhdistetty kaava**, jolla saadaan jälleen tarkempi approksimaatio integraalille

$$\int_a^b f(x) dx.$$

Integrointiväli $[a, b]$ jaetaan tasaväleihin seuraavasti:

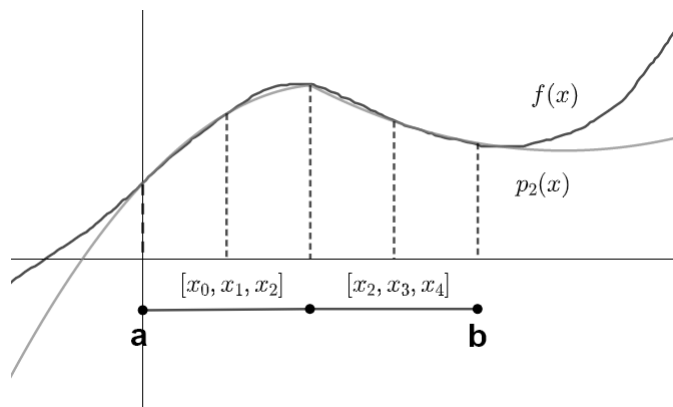
$$[x_0, x_1, x_2], [x_2, x_3, x_4], \dots, [x_{2m-4}, x_{2m-3}, x_{2m-2}], [x_{2m-2}, x_{2m-1}, x_{2m}].$$

Näihin väleihin sovelletaan Simpsonin 1/3-sääntöä erikseen ja väleille saadut approksimaatiot summataan yhteen. Osavälien pituus on $h = (b-a)/2m$, koska osavälejä on nyt parillinen määrä $2m$ eikä m kuten aikaisemmin. Parillisuus tulee Simpsonin 1/3-säännöstä, koska osavälejä on aina kaksi.

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x) dx &= \sum_{i=1}^m \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x) dx \\
&\approx \sum_{i=1}^m \underbrace{\frac{(x_{2i-2} - x_{2i})}{2}}_h \frac{1}{3} [f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] \\
&= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h}{3} [f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \dots \\
&\quad + \frac{h}{3} [f(x_{m-4}) + 4f(x_{m-3}) + f(x_{m-2})] + \frac{h}{3} [f(x_{m-2}) + 4f(x_{m-1}) + f(x_m)]
\end{aligned}$$

Näin saatiin **yhdistetty Simpsonin 1/3-sääntö**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_4) + \dots \right. \\
\left. + 2f(x_{2m-2}) + 4f(x_{2m-1}) + f(x_{2m}) \right].$$



KUVA 3.4. Väli $[a, b]$ on jaettu kahteen väliin, jotka integroidaan erikseen Simpsonin 1/3-säännöllä ja näiden välien integraalit summataan yhteen.

ESIMERKKI 3.4. Käytetään samaa funktiota

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

kuten aikaisemminkin. Lasketaan funktion integraali välillä $[0, 3]$ yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä. Väli $[0, 3]$ jaettu kolmeen väliin. Välit ovat $[0, 1]$, $[1, 2]$ ja $[2, 3]$. Näille väleille sovelletaan Simpsonin 1/3-sääntöä. Funktion arvot integrointipisteissä ovat $f(0) = 6$, $f(0,5) = 11,1875$, $f(1) = 75$, $f(1,5) = 409,3125$, $f(2) = 1496$, $f(2,5) = 4199,4375$ ja $f(3) = 9879$.

$$\begin{aligned}
\int_0^3 f(x) dx &= \int_0^1 f(x) dx + \int_1^2 f(x) dx + \int_2^3 f(x) dx \\
&\approx \frac{1}{6} [f(0) + 4f(0,5) + 2f(1) + 4f(1,5) + 2f(2) + 4f(2,5) + f(3)] \\
&= \frac{1}{6} (6 + 2 \cdot (1496 + 75) + 4 \cdot (11,1875 + 409,3125 + 4199,4375) + 9879) \\
&= 5\,251,125
\end{aligned}$$

Tarkkaa arvoa ja yhdistetyn Simpsonin 1/3-säännön avulla laskettua arvoa vertaamalla saamme laskettua virheen.

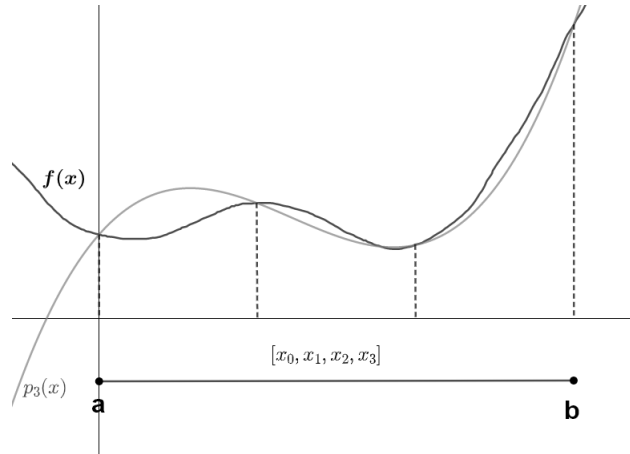
$$5\,251,125 - 5\,244,75 = 6,375$$

$$\frac{5\,251,125 - 5\,244,75}{5\,244,75} \cdot 100\% \approx 0,12\%$$

Nyt approksimaatio parani 80 kertaisesti edellisestä esimerkistä, jossa virhe oli 516,375. Osavälien määrä puolestaan kolminkertaistui ja välin pituus lyheni kolmannekseen.

3.3. Simpsonin 3/8-sääntö

Samalla tavalla, kuin johdettiin Simpsonin 1/3-sääntö, voidaan johtaa edelleen neljälle pisteelle numeerinen integrointikaava, jota kutsutaan Simpsonin 3/8-säännöksi.



KUVA 3.5. Funktion $f(x)$ määrätty integraali välillä $[a, b]$ laskettuna Simpsonin 3/8-säännöllä. Tällöin integroidaan Lagrangen interpolatiopolynomi $p_3(x)$, joka kulkee neljän funktion f pisteen kautta.

Kun $n = 3$, niin silloin interpolointipisteet ovat $x_0 = a$, $x_1 = a + (b - a)/3$, $x_2 = b - (b - a)/3$ ja $x_3 = b$. Lagrangen kolmatta-astetta oleva interpolatiopolynomi funktiolle f on

$$p_3(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) + L_3(x)f(x_3).$$

Integroidaan interpolaatiopolynomi

$$\begin{aligned} \int_a^b p_3(x) dx &= f(x_0) \underbrace{\int_a^b L_0(x) dx}_{\frac{b-a}{3} \frac{3}{8}} + f(x_1) \underbrace{\int_a^b L_1(x) dx}_{\frac{b-a}{3} \frac{9}{8}} \\ &\quad + f(x_2) \underbrace{\int_a^b L_2(x) dx}_{\frac{b-a}{3} \frac{9}{8}} + f(x_3) \underbrace{\int_a^b L_3(x) dx}_{\frac{b-a}{3} \frac{3}{8}} \end{aligned}$$

Näin saadaan numeerinen integrointikaava, jota kutsutaan **Simpsonin 3/8-säännöksi**. Tässä kaavassa funktiota f approksimoidaan kolmannen asteen polynomilla. Nimitys 3/8-sääntö tulee kertoimesta kaavassa.

$$\int_a^b p_3(x) dx = \underbrace{\frac{b-a}{3}}_h \frac{3}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \approx \int_a^b f(x) dx$$

ESIMERKKI 3.5. Käytetään samaa funktiota

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

kuten aikaisemminkin. Lasketaan funktiolle integraali välillä $[0, 3]$ Simpsonin 3/8-säännön avulla. Funktion arvot integrointipisteissä ovat $f(0) = 6$, $f(1) = 75$, $f(2) = 1496$ ja $f(3) = 9879$ sekä tarkka arvo funktion f intergraalille on 5244,75.

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \underbrace{\frac{b-a}{3}}_h \frac{3}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \\ &= \frac{3-0}{3} \frac{3}{8} [f(0) + 3f(1) + 3f(2) + f(3)] \\ &= \frac{3}{8} [6 + 3 \cdot 75 + 3 \cdot 1496 + 9879] \\ &= 5474,25 \end{aligned}$$

Tarkkaa arvoa ja Simpsonin 3/8-säännön avulla lasketua arvoa vertaamalla saadaan laskettua virhe.

$$5474,25 - 5244,75 = 229,5$$

$$\frac{5474,25 - 5244,75}{5244,75} \cdot 100\% \approx 4,38\%$$

Kun verrataan edellisiin esimerkkeihin, niin huomataan osavälin pituuden olevan verrannollinen virheen suuruuteen. Simpsonin 1/3-säännöllä saatiin virheeksi 516,375. Nyt yhden osavälin lisäämisellä virhe saatiin puolitettua. Simpsonin yhdistetyllä 1/3-säännöllä osavälejä oli kuusi ja saatiin virheeksi 6,375. Tässä esimerkissä osavälejä oli puolet vähemmän eli kolme ja virhe taas on noin 40 kertaa suurempi kuin Simpsonin yhdistetyllä 1/3-säännöllä kaskettuna. Kun osavälien pituus kaksinkertaistui, niin virhe 40-kertaistui.

Seuraavaksi esitellään **Simpsonin 3/8-säännölle yhdistetty kaava**, jolla saadaan jälleen tarkempi approksimaatio integraalille

$$\int_a^b f(x) dx.$$

Integrintiväli $[a, b]$ jaetaan tasaväleihin seuraavasti:

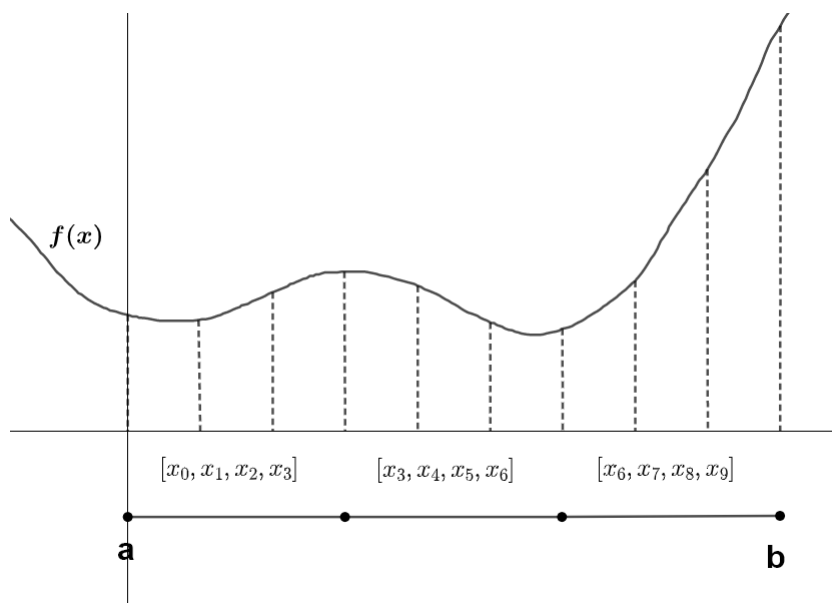
$$[x_0, x_1, x_2, x_3], [x_3, x_4, x_5, x_6], \dots, [x_{3m-6}, x_{3m-5}, x_{2m-4}, x_{3m-3}], \\ [x_{3m-3}, x_{3m-2}, x_{3m-1}, x_{3m}],$$

Näihin väleihin sovelletaan Simpsonin 3/8-sääntöä erikseen ja väleille saadut approksimaatiot summataan yhteen. Osavälin pituus $h = (b-a)/3m$, koska osavälejä on nyt kolmella jaollinen määrä $3m$. Kolmella jaollisuus tulee Simpsonin 3/8-säännöstä, koska osavälejä on aina kolme.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^m \int_{x_{3i-3}}^{x_{3i}} f(x) dx \\ \approx \sum_{i=1}^m \underbrace{\frac{(x_{3i-3} - x_{3i})}{3}}_h \frac{3}{8} [f(x_{3i-3}) + 3f(x_{3i-2}) + 3f(x_{3i-1}) + f(x_{3i})]$$

Tästä saadaan kaava **yhdistetty Simpsonin 3/8-sääntö**

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_4) + \dots \right. \\ \left. + 2f(x_{2m-3}) + 3f(x_{2m-2}) + 3f(x_{2m-1}) + f(x_{2m}) \right].$$



KUVA 3.6. Väli $[a, b]$ on jaettu kolmeen väliin, jotka integroidaan erikseen Simpsonin 3/8-säännöllä ja näiden välien integraalit summataan yhteen.

ESIMERKKI 3.6. Käytetään samaa funktiota

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

kuten aikaisemminkin. Lasketaan integraali välillä $[0, 3]$ yhdistetyllä Simpsonin 3/8-säännöllä. Nyt välit ovat $[0, 1]$, $[1, 2]$ ja $[2, 3]$. Näille väleille sovelletaan Simpsonin 3/8-säännöä. Integrointipisteiden vastaavat funktion arvot ovat

$$\begin{array}{ccccc} f(0) = 6 & f\left(\frac{1}{3}\right) = \frac{631}{81} & f\left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1604}{81} & f(1) = 75 & f\left(\frac{4}{3}\right) = \frac{19834}{81} \\ f\left(\frac{5}{3}\right) = \frac{52991}{81} & f(2) = 1496 & f\left(\frac{7}{3}\right) = \frac{246739}{81} & f\left(\frac{8}{3}\right) = \frac{59950}{81} & f(3) = 9879 \end{array}$$

$$\begin{aligned} \int_0^3 f(x) dx &= \int_0^1 f(x) dx + \int_1^2 f(x) dx + \int_2^3 f(x) dx \\ &\approx \frac{1}{8} \left[f(0) + 3f\left(\frac{1}{3}\right) + 3f\left(\frac{2}{3}\right) + 2f(1) \right. \\ &\quad \left. + 3f\left(\frac{4}{3}\right) + 3f\left(\frac{5}{3}\right) + 2f(2) + 3f\left(\frac{7}{3}\right) + 3f\left(\frac{8}{3}\right) + f(3) \right] \\ &= \frac{1}{8} (6 + 2 \cdot (1496 + 75) + 3 \cdot (11, 1875 + 409, 3125 + 4199, 4375) + 9879) \\ &= \frac{62971}{12} \approx 5247,583 \end{aligned}$$

Tarkkaa arvoa ja yhdistetyllä Simpsonin 3/8-säännöllä laskettua arvoa vertaamalla saadaan virhe.

$$5247,583 - 5\,244,75 = 2,833$$

$$\frac{5247,583 - 5\,244,75}{5\,244,75} \cdot 100\% \approx 0,054\%$$

Virhe pieneni nyt 80-osaan, kun verrataan aikaisemmin Simpsonin 3/8-säännöllä saadun tuloksen virheeseen. Välin pituus pieneni kolmannekseen. Sama verranto saatiin Simpsonin 1/3-säännön sekä yhdistetyn 1/3-säännön välin pituuden ja virheen välille. Tästä voidaan päätellä, että virhe käyttäytynee samallatavoin Simpsonin 3/8- ja 1/3 säännöillä. Seuraavassa kappaleessa tarkastellaan virhettä tarkemmin.

3.4. Virheen arviointia

Seuraavaksi arvioidaan virheen suuruutta Newton-Cotesin numeerisissa integrointikaavoissa. Virhettä syntyy, kun alkuperäisen funktion integroimisen sijaan integroidaan Lagrangen polynomifunktiota. Virheen arviointi on pahimman mahdollisen eli maksimaalisen virheen laskemista. Virhe on aina positiivinen luku ja sen takia virheen kaavassa on itseisarvomerkit. Virhe R_n saadaan alkuperäisen funktion f integraalin ja Lagrangen polynomifunktion integraalin erotuksella.

$$R_n(f) = \int_a^b f(x) dx - \int_a^b p_n(x) dx$$

Seuraavassa lauseessa on esitetty virheen laskemiseksi yleinen kaava, joka on käytökelpoinen vain jos alkuperäinen funktio on riittävän sileä.

LAUSE 3.1. *Olkoon $n \geq 1$. Oletetaan että f on reaaliarvoinen funktio, määritelty ja jatkuva välillä $[a, b]$, olkoon $f^{(n+1)}$ olemassa ja jatkuva välillä $[a, b]$. Tällöin*

$$(3.1) \quad |R_n(f)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right| dx,$$

missä

$$M_{(n+1)} = \max_{\xi \in [a, b]} |f^{(n+1)}(\xi)|.$$

Todistus.

koska

$$R_n(f) = \int_a^b [f(x) - p_n(x)] dx$$

niin

$$|R_n(f)| \leq \int_a^b |f(x) - p_n(x)| dx$$

Lagrangen interpolaatiopolynomien virheen kaavaa (2.2) käyttämällä saadaan.

$$|R_n(f)| \leq \int_a^b |f(x) - p_n(x)| dx \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right| dx \quad \square$$

3.5. Puolisuunnikassäännön virhe

Puolisuunnikassääntö antaa tarkan arvon korkeintaan astetta $n \leq 1$ olevien polynomifunktioiden integraaleille. Virhe saa arvo $R(f, x) = 0$, kun funktion f kuvaaja on suora. Tarkka arvo virheelle on

$$R_1(f) = \int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)].$$

Kun sitä ei voida laskea, niin lasketaan virheelle arvio kaavalla (3.1). Nyt $n = 1$ ja $\prod_{i=0}^1 (x - x_i) = (x - a)(x - b)$. Puolisuunnikassäännöllä lasketun integraalin $\int_a^b f(x) dx$ virheen yläraja on

$$\begin{aligned} |R_1(f)| &\leq \frac{M_2}{2!} \int_a^b |(x-a)(x-b)| dx \\ &= \frac{M_2}{2} \left| -\frac{1}{6} (b-a)^3 \right| \\ &= \frac{M_2}{12} (b-a)^3, \text{ missä } M_2 = \max_{\xi \in [a,b]} |f''(\xi)| \end{aligned}$$

ESIMERKKI 3.7. Jos $f(x) = x^2$, niin lauseen antama yläraja virheelle on $\frac{1}{6} (b-a)^3$, koska $M_2 = f''(x) = 2$. Tässä tapauksessa voidaan laskea tietysti myös tarkka arvo virheelle. Lasketaan $R(f, x)$ vähentämällä tarkasta integraalista puolisuunnikassäännöllä laskettu integraali, kun $f(x) = x^2$.

$$\begin{aligned} |R_1(f)| &= \left| \int_a^b x^2 dx - \frac{(b-a)}{2} (b^2 + a^2) \right| \\ &= \left| -\frac{1}{6} (b-a)^3 \right| \\ &= \frac{1}{6} (b-a)^3 \end{aligned}$$

Virheen tarkka arvo on sama kuin virheen kaavalla saatu arvio tässä tapauksessa, kun $f(x) = x^2$.

Yhdistetyn puolisuunnikassäännön virhe arvioidaan väleittäin

$$\begin{aligned} R_1(f) &= \int_a^b f(x) dx - \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)] \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx - \frac{h}{2} (f(x_{i-1}) + f(x_i)) \right], \quad \text{missä } h = \frac{b-a}{m}. \end{aligned}$$

Välien virheiden ylärajat summataan yhteen ja yhdistetyn puolisuunnikassäännön virheen ylärajaksi saadaan

$$|R_1(f)| \leq \frac{mh^3}{12} M_2 = \frac{(b-a)^3}{12m^2} M_2, \quad \text{missä } M_2 = \max_{\xi \in [a,b]} |f''(\xi)|.$$

Kuten puolisuunnikassääntö, integroi yhdistetty puolisuunnikassääntökin täsmällisesti polynomit joiden asteluku $n \leq 1$. Virheen ylärajaan vaikuttaa välien määrä m . Kun osavälien määrää m lisätään, niin jakajassa olevan termi m^2 suurenee ja näin virheen yläraja pienenee. Jos esimerkiksi välien määrä lisääntyy yhdestä kolmeen, niin virheen yläraja pienenee yhdeksänteen osaan. Virhe on suoraan verrannollinen pisteiden välin h pituuteen. Puolisuunnikassäännön virheen aste on $\mathcal{O}h^2$, joka ilmoittaa missä suhteessa välin pituus muuttaa virhettä. Selkeämmin asteluku tulee esille extrapolointimenetelmä kappaleessa, jossa virhe kirjoitetaan sarjamuotoon.

ESIMERKKI 3.8. Lasketaan virheen yläraja funktion

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

puolisuunnikassäännöllä lasketulle integraalille välillä $[0, 3]$. Lasketaan osaväleille $m = 1$ ja $m = 3$. Funktion f toinen derivaatta on $f''(x) = 600x^3 + 360x^2 + 30x + 2$ ja se saa suurimman arvonsa välillä $[0, 3]$ pisteessä $x = 3$ ja $M_2 = \max_{x \in [0,3]} |f''(x)| = f''(3) = 19712$.

$$\begin{aligned} m = 1; \quad |R_1(f)| &\leq \frac{(3-0)^3}{12 \cdot 1^2} 19712 = 44352 \\ m = 3; \quad |R_1(f)| &\leq \frac{(3-0)^3}{12 \cdot 3^2} 19712 = 4928 \end{aligned}$$

Vastaavat todelliset virheet ovat 9582,75 ja 1268,75, joten virheiden ylärajat eivät ole kovinkaan lähellä näitä arvoja. Virheen ylärajan arviosta nähdään kuitenkin, että tarkkuus paranee m^2 kertaisesti eli virhe pienenee 9-osaan, kun välien määrä lisääntyy yhdestä kolmeen.

3.6. Simpsonin 1/3-säännön virhe

Kun lasketaan virheen kaavalla (3.1) arvio Simpsonin 1/3-säännön virheelle, saamme virheen ylärajaksi

$$\begin{aligned} |R_2(f)| &\leq \frac{M_3}{3!} \int_a^b \left| (x-a) \left(x - \left(\frac{a+b}{2} \right) \right) (x-b) \right| dx \\ &= \frac{M_3}{196} (b-a)^4, \text{ missä } M_3 = \max_{\xi \in [a,b]} |f'''(\xi)|. \end{aligned}$$

Tämä arvio on kuitenkin aivan liian suuri. Voimme osoittaa, että **Simpsonin 1/3-säännön virheen yläraja** on

$$|R_2(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} M_4 = \frac{h^5}{90} M_4, \text{ missä } M_4 = \max_{\xi \in [a,b]} |f^{(4)}(\xi)|$$

Todistus (Katso [3, 205–207])

Jos polynomi on korkeintaan kolmatta astetta, niin derivaatta $f^{(4)} = 0$ ja virheen yläraja on myös $R_2(f) = 0$. Koska Simpsonin 1/3-sääntö perustuu toisen asteen Lagrangen polynomin integroimiseen, niin tämä tarkoittaa että toisen asteen polynomilla approksimoimme kolmannen asteen polynomin tarkasti.

Yhdistetyn Simpsonin 1/3-säännön virhe arvioidaan väleittäin

$$\begin{aligned} R_2(f) &= \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=1}^m \frac{h}{3} [f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x) dx - \frac{h}{3} [f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] \right], \text{ missä } h = \frac{b-a}{2m}. \end{aligned}$$

Välien virheiden ylärajat summataan yhteen ja yhdistetyn Simpsonin 1/3-säännön virheen ylärajaksi saadaan

$$|R_2(f)| \leq \frac{mh^5}{90} M_4 = \frac{(b-a)^5}{2880m^4} M_4, \text{ missä } M_4 = \max_{\zeta \in [a,b]} |f^{(4)}(\zeta)|$$

Kuten Simpsonin 1/3-sääntö, integroi yhdistetty Simpsonin 1/3-sääntökin täsmällisesti polynomit joiden asteluku $n \leq 3$. Jos välien määrä m lisääntyy yhdestä kolmeen, niin virheen yläraja pienenee 81-osaan. Simpsonin 1/3-säännön virheen asteluku on $\mathcal{O}h^4$ eli välin pituuden muutos vaikuttaa virheeseen h^4 kertaisesti.

ESIMERKKI 3.9. Lasketaan virheen yläraja funktion

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

Simpsonin 1/3-säännöllä lasketulle integraalille välillä $[0, 3]$. Lasketaan virheen yläraja osavälien määrille $m = 1$ ja $m = 3$. Funktion f neljäs derivaatta on $f^{(4)}(x) =$

$3600x + 1440$ ja se saa suurimman arvonsa välillä $[0, 3]$ pisteessä $x = 3$. $M_4 = \max_{x \in [0,3]} |f^4(x)| = f^4(3) = 12240$.

$$m = 1; |R_1(f)| \leq \frac{(3-0)^5}{2880 \cdot 1^4} 12240 = 1032,75$$

$$m = 3; |R_1(f)| \leq \frac{(3-0)^5}{2880 \cdot 3^4} 12240 = 12,75$$

Vastaavat todelliset virheet ovat 516,375 ja 6,375. Virheen yläraja on kaukana siitä oikeasta virheestä mikä Simpsonin 1/3-säännöllä integraalin laskemisessa oikeasti tehdään. Virheen ylärajan arviosta nähdään kuitenkin, että virhe pienenee 81-osaan.

3.7. Simpsonin 3/8 -säännön virhe

Yleisellä virheen kaavalla (3.1) saadaan laskettua Simpsonin 3/8-säännön virheen yläraja, joka on

$$\begin{aligned} |R_3(f)| &\leq \frac{M_4}{24} \frac{1}{270} (b-a)^5 \\ &= \frac{(b-a)^5}{6480} M_4 = \frac{3h^5}{80} M_4, \text{ missä } M_4 = \max_{\zeta \in [a,b]} |f^4(\zeta)| \end{aligned}$$

Nyt kaavalla saadaan hyvä approksimaatio virheelle, toisin kuin edellä Simpsonin 1/3-säännöllä. Molemmat säännöt integroivat täsmällisesti polynomit joiden asteluku $n \leq 3$. Taulukosta 2 nähdään, ettei kaavojen tarkkuus parane johdonmukaisesti m^n vaan virheen asteluku paranee pareittain.

Samaan tapaan kuin laskettiin yhdistetylle Simpsonin 1/3-säännölle virheen yläraja voidaan laskea **yhdistetylle Simpsonin 3/8-säännölle virheen ylärajan**

$$|R_3(f)| \leq \frac{m3h^5}{80} M_4 = \frac{(b-a)^5}{6480m^4} M_4, \text{ missä } M_4 = \max_{\zeta \in [a,b]} |f^4(\zeta)|$$

Kuten Simpsonin 3/8-sääntö, integroi yhdistetty Simpsonin 3/8-sääntökin täsmällisesti polynomit joiden asteluku $n \leq 3$.

ESIMERKKI 3.10. Lasketaan funktion

$$f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$$

Simpsonin 3/8-säännöllä lasketulle integraalille välillä $[0, 3]$ virheen yläraja. Lasketaan virheen yläraja osavälien määrille $m = 1$ ja $m = 3$. Funktion f neljäs derivaatta on $f^4(x) = 3600x + 1440$ ja se saa suurimman arvonsa välillä $[0, 3]$ pisteessä $x = 3$. $M_4 = \max_{x \in [0,3]} |f^4(x)| = f^4(3) = 12240$.

$$m = 1; |R_1(f)| \leq \frac{(3-0)^5}{6480 \cdot 1^4} 12240 = 459$$

$$m = 3; |R_1(f)| \leq \frac{(3-0)^5}{6480 \cdot 3^4} 12240 = 5,6666\dots$$

Vastaavat todelliset viheet ovat 229,5 ja 2,833. Virheen ylärajan arviosta nähdään, että tarkkuus paranee m^4 kertaistisesti. Simpsonin 3/8-säännön virheen aste on $\mathcal{O}h^4$.

3.8. Yhteenveto

Funktiolle $f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$ on laskettu numeerinen integraali välillä $[0, 3]$ eri säännöillä. Myös todellinen virhe sekä virheen yläraja on laskettu. Taulukkoon 1 on koottu nämä tulokset edellisistä esimerkeistä. Kuten jo todettiin, ei virheen laskennallinen yläraja anna kovinkaan hyvää kuvaa oikeasta virheestä, mutta sen avulla pystytään arvioimaan kuinka välien määrä vaikuttaa virheen suuruusluokkaan. Numeerisen integraalin tarkkuuteen vaikuttavat funktio, käytetty menetelmä ja välin jako.

TAULUKKO 1. *Funktion $f(x) = 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6$ numeerinen integraali välillä $[0, 3]$. Yhdistetyissä kaavoissa väli on jaettu kolmeen osaväliin. Taulukon tulokset on laskettu edellisissä esimerkeissä. Tarkka arvo tälle integraalille on 5244,75.*

n	nimi	tulos	virhe	virheen yläraja
1	Puolisuunnikassääntö	14 827,5	9 582,75	44352
2	Simpsonin 1/3-sääntö	5761,125	516,375	1032,75
3	Simpsonin 3/8-sääntö	5474,25	229,5	459
1	Yhdistetty puolisuunnikassääntö	6 513,5	1 268,75	4928
2	Yhdistetty Simpsonin 1/3-sääntö	5251,125	6,375	12,75
3	yhdistetty Simpsonin 3/8-sääntö	5247,833	2,833	5,67

Palataan kappaleen alussa johdettuun Newton-Cotesin n asteen kaavan, joka oli

$$(3.2) \quad \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p_n(x) dx = \sum_{k=0}^n w_k f(x_k), \quad k = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Kaavasta voidaan johtaa sääntöjä enemmänkin. Taulukossa 2 on listattu kolme sääntöä lisää. Kun $n \geq 7$, eivät säännöt ole enää käyttökelpoisia. Tällöin joihinkin kaavoihin tulee negatiivisia kertoimia ja tällaiset kaavat eivät sovellu numeeriseen integrointiin, kun osa summan termeistä kumoutuu. Luvussa Lagrangen interpolaatio havainnollistimme Runge ilmiön kuvassa (2.3), joka on ongelma myös Newton-Cotesin kaavoissa asteluvun kasvaessa. Tämän ilmiön kannalta onkin turvallisempaa käyttää yhdistettyjä sääntöjä kuin kasvattaa polynomin p_n astelukua.

Interpolaatioon perustuvasta Newton-Cotesin kaavasta on käsitelty tarkemmin käytetyimmät kolme sääntöä ja niiden yhdistetyt säännöt. Kuten olemme esimerkein

TAULUKKO 2. Seuraavat säännöt saadaan, kun n asteen Newton-Cotesin kaavaa sovelletaan tapauksiin $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$. Sijoitetaan taulukoidut kertoimet seuraavasti $\int_a^b p_n(x) dx = \frac{(b-a)}{n} s \sum_{k=0}^n \theta_k f(x_k)$.

n	nimi	s	θ_k	virhe	asteluku
1	Puolisuunnikassääntö	$\frac{1}{2}$	1 1	$h^3 \frac{1}{12} f''(\zeta)$	$\mathcal{O}h^2$
2	Simpsonin 1/3-sääntö	$\frac{1}{3}$	1 4 1	$h^5 \frac{1}{90} f^4(\zeta)$	$\mathcal{O}h^4$
3	Simpsonin 3/8-sääntö	$\frac{3}{8}$	1 3 3 1	$h^5 \frac{3}{80} f^4(\zeta)$	$\mathcal{O}h^4$
4	Milnen sääntö	$\frac{2}{45}$	7 32 12 32 7	$h^7 \frac{8}{945} f^6(\zeta)$	$\mathcal{O}h^6$
5		$\frac{5}{288}$	19 75 50 50 75 19	$h^7 \frac{275}{12096} f^6(\zeta)$	$\mathcal{O}h^6$
6	Weddlen sääntö	$\frac{1}{140}$	41 216 27 272 27 216 41	$h^9 \frac{9}{1400} f^8(\zeta)$	$\mathcal{O}h^8$

todenneet, näillä säännöillä saadaan lisää tarkkuutta, kun välejä lisätään. Virheen asteluku paranee integrointipisteiden lisääntyessä, kuten näemme taulukosta 2. Kun pisteet lisääntyvät, lyhenee pisteiden välinen etäisyys h . Kunkin säännön virheen asteluku kertoo kuinka paljon h pituuden muutos vaikuttaa virheeseen. Mitä suurempi eksponentti asteluvussa on, sitä enemmän h pituuden muutos vaikuttaa virheen suuruuteen. Säännön ja yhdistetyn säännön virheen asteluku on kuitenkin sama. Seuraavaksi on tarkoituksena parantaa virheen astelukua. Vaihdetaan interpolointi ekstrapolointiin, koska integroitavan interpolaatiopolynomin asteluku asettaa rajan virheen asteluvulle. Jotta päästään ekstrapoloimaan, on virhe määritettävä ensin sarjana.

Euler-Maclaurin summakaava

Yhdistetyn puolisuunnikassäännön virheen rajoittavaksi termiksi saatiin $\frac{1}{m^2}$, jossa m on välien määrä integroimisvälillä $[a, b]$. Seuraavaksi johdetaan Euler-Maclaurin summakaava, jossa tämä virhe saadaan sarjamuotoon. Edelleen sarjamuodosta päästään ekstrapoloimaan virheen astelukua tarkemmaksi.

Noin vuonna 1735 Leonhard Euler ja Colin Maclaurin keksivät kaavan, jolla pystytään esittämään riittävän sileä funktio sarjana. He eivät keksineet sitä yhdessä, vaan kumpikin omilla tahoillaan. Maclaurin käytti tätä kaavaa integraalien laskemiseen ja Euler kehitti kaavan summien laskemista varten. Seuraavassa luvussa käytetään tätä kaavaa ekstrapolointiin.

Määritetään ensin polynomien sarja.

MÄÄRITELMÄ 4.1. Polynomit z_r , $r = 1, 2, 3, \dots$ muodostetaan seuraavien ehtojen mukaan

- (i) z_r on polynomi, jonka asteluku on r ;
- (ii) $z'_{r+1} = z_r$;
- (iii) z_r on parillinen funktio, jos r on parillinen ja z_r on pariton funktio, jos r on pariton;
- (iv) jos $r > 1$ ja pariton, niin $z_r(-1) = 0$ ja $z_r(1) = 0$;
- (v) $z_1(t) = -t$;

Muodostetaan polnomeja z_r käyttäen ensin kohtia (ii) ja (iv) saadaan

$$z_2(t) = -\frac{1}{2}t^2 + A_2, \quad z_3(t) = -\frac{1}{6}t^3 + A_2t + A_3$$

Ratkaistaan vakiot A_2 ja A_3 . Ehdosta (iii) saadaan että $A_3 = 0$ ja ehdosta (iv) seuraa että $A_2 = \frac{1}{6}$. Polynomit voidaan kirjoittaa

$$z_2(t) = -\frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{6}, \quad z_3(t) = -\frac{1}{6}t^3 + \frac{1}{6}t.$$

Seuraavat polynomit z_4, z_5, \dots, z_r saadaan samalla tavalla.

LAUSE 4.2. *Oletetaan, että funktio g on määritelty ja jatkuva välillä $[-1, 1]$. Lisäksi funktiolla on jatkuva derivaatta astetta $2k$ tällä välillä. Todistetaan, että*

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 g(t) dt - [g(-1) + g(1)] &= \int_{-1}^1 -tg'(t) dt \\ &= \sum_{r=1}^k z_{2r}(1) \left[g^{(2r-1)}(-1) - g^{(2r-1)}(1) \right] - \int_{-1}^1 z_{2k}(t) g^{2k}(t) dt. \end{aligned}$$

Todistus. Huomataan, että $\int_{-1}^1 g(t) dt - [g(-1) + g(1)]$ on funktion $g(t)$ puolisuunnikassäännöllä lasketun integraalin virhe, kun integrointiväli on $[-1, 1]$. Osittaisintegroitikaavalla saamme

$$\int_{-1}^1 -tg'(t) dt = \int_{-1}^1 -tg(t) - \int_{-1}^1 -g(t) dt = -[g(-1) + g(1)] + \int_{-1}^1 g(t) dt$$

eli ensimmäinen rivi on todistettu. Seuraavaksi käytetään uudestaan osittaisintegroitikaavaa toisinpäin kuin edellä ja toistetaan tätä. Lisäksi käytetään edellisen määritelmän ehtoa $z_1(t) = -t$ ja $z'_{r+1} = z_r$. Saadaan, että

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 -tg'(t) dt &= \int_{-1}^1 z_1(t) g'(t) dt \\ &= \int_{-1}^1 z_2(t) g'(t) - \int_{-1}^1 z_2(t) g''(t) dt \\ &= \int_{-1}^1 z_2(t) g'(t) - \int_{-1}^1 z_3(t) g''(t) - \int_{-1}^1 z_3(t) g^3(t) dt \\ &= \int_{-1}^1 z_2(t) g'(t) - \int_{-1}^1 z_3(t) g''(t) - \dots \\ &\quad - \int_{-1}^1 z_{2k}(t) g^{(2k-1)}(t) - \int_{-1}^1 z_{2k}(t) g^{2k}(t) dt. \end{aligned}$$

Sitten käytetään z_r ominaisuuksia (iii) ja (iv) eli kaikki parittomat $z_r(1) = 0$ ja $z_r(-1) = 0$

$$= \sum_{r=1}^k z_{2r}(1) [g^{(2r-1)}(-1) - g^{(2r-1)}(1)] - \int_{-1}^1 z_{2k}(t) g^{2k}(t) dt. \quad \square$$

LAUSE 4.3. (*Euler-Maclaurin summakaava*) Olkoon $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ funktio, jolla on jatkuvat derivaatat $2k$ -kertalukuun asti välillä $[a, b]$. Jaetaan väli $[a, b]$ m tasavälisesti osaväleihin $[x_{i-1}, x_i]$, jossa $x_i = a + ih$ ja $h = (b - a) / m$. Olkoon $T(m)$ yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä laskettu likiarvo integraalille $I = \int_a^b f(x) dx$. Tällöin

(4.1)

$$I - T(m) = \sum_{r=1}^k c_r h^{2r} [f^{(2r-1)}(a) - f^{(2r-1)}(b)] - \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_{2k}(t) f^{2k}(x) dx,$$

missä $t = t(x) = -1 + \frac{2}{h}(x - x_{i-1})$, kun $x \in [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, 3, \dots, m$ ja $c_r = \frac{z_{2r}(1)}{2^{2r}}$, kun $r = 1, 2, 3, \dots, k$.

Todistus. Kirjoitetaan I summana yli osavälien $[x_{i-1}, x_i]$

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx$$

ja tehdään muuttujanvaihto $x = x_{i-1} + \frac{h}{2}(t+1)$, $dx = \frac{h}{2}$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx = \frac{h}{2} \int_{-1}^1 g(t) dt$$

missä $f(x) = g(t)$. Lauseen 4.2. mukaan

$$\begin{aligned} I - T(m) &= \sum_{i=1}^m \left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx - \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)] \right] \\ &= \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \left[\int_{-1}^1 g(t) dt - [g(-1) + g(1)] \right] \\ &= \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \left[\sum_{r=1}^k z_{2r}(1) [g^{(2r-1)}(-1) - g^{(2r-1)}(1)] - \int_{-1}^1 z_{2k}(t) g^{2k}(t) dt \right]. \end{aligned}$$

Huomataan, että derivaatta $g^{(l)}(t) = \left(\frac{2}{h}\right)^l f^{(l)}(x)$, $l = 1, 2, 3, \dots, 2k$, $dt = \frac{2}{h} dx$

$$\begin{aligned} &= \frac{h}{2} \sum_{i=1}^m \left[\sum_{r=1}^k z_{2r}(1) \left[\left(\frac{h}{2}\right)^{2r-1} f^{(2r-1)}(x_{i-1}) - \left(\frac{h}{2}\right)^{2r-1} f^{(2r-1)}(x_i) \right] \right. \\ &\quad \left. - \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_{2k}(t) \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} f^{2k}(x) \left(\frac{2}{h}\right) dx \right] \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{r=1}^k z_{2r}(1) \left(\frac{h}{2}\right)^{2r} \left[f^{(2r-1)}(x_{i-1}) - f^{(2r-1)}(x_i) \right] - \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_{2k}(t) f^{2k}(x) dx. \end{aligned}$$

Nyt kun summataan kaikki m välit $x \in [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, 2, 3, \dots, m$ niin huomataan, että derivaatat pisteissä x_i kumoutuvat ja jäljelle jäävät derivaatat päätepisteissä a ja b . Saadaan

$$= \sum_{r=1}^k c_r h^{2r} \left[f^{(2r-1)}(a) - f^{(2r-1)}(b) \right] - \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_{2k}(t) f^{2k}(x) dx$$

eli se mitä haluttiin. Puolisuunnikkasäännön virhe on nyt sarjana. \square

Kun merkitään $c_r [f^{(2r-1)}(a) - f^{(2r-1)}(b)] = C_r$, saadaan kaava muotoon

$$\int_a^b f(x) dx - T(m) = C_1 h^2 + C_2 h^4 + C_3 h^6 + \dots + C_{k-2} h^{2(k-2)} + C_{k-1} h^{2(k-1)} + \mathcal{O}h^{2k}.$$

Tästä muodosta nähdään selkeämmin virheen sarjamuoto. Seuraavassa kappaleessa eliminoidaan ensin virhetermi h^2 . Kun jatketaan eliminointia, niin saadaan rekursiokaava, jolla voidaan eliminoida lisää virhetermejä.

Aikaisemmin mainittu virheen asteluku oli puolisuunnikassäännöllä $\mathcal{O}h^2$. Virheen sarjamuodosta huomaanne, että ensimmäisenä virheterminä on C_1h^2 eli puolisuunnikassäännön virheen asteluku on $\mathcal{O}h^2$. Kun eliminoimme virhetermejä, niin paranee virheen asteluku.

Merkitä $\mathcal{O}h^{2k}$ tarkoittaa nyt termiä $-\left(\frac{h}{2}\right)^{2k} \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_{2k}(t) f^{2k}(x) dx$, joka on kunkin eliminointi kerran jälkeen aina 2 astetta parempi, kuten seuraavassa kappaleessa ekstrapolointimenetelmä huomataan. Ekstrapolointimenetelmän etu on se, että tarkkuus paranee rekursion edetessä kohti tarkkaa arvoa varmasti.

HUOMAUTUS 4.4. Peräkkäin muodostettujen polynomien $z_r(t)$ avulla saamme laskettua arvot

$$c_r = \frac{z_{2r}(1)}{2^{2r}}, r = 1, 2, 3, \dots, k$$

$$c_1 = -\frac{1}{12}, c_2 = \frac{1}{720}, c_3 = -\frac{1}{30240}, c_4 = \frac{1}{1209600}, c_5 = -\frac{1}{47900160}, \dots$$

voidaan osoittaa, että $c_r = \frac{B_{2r}}{(2r)!}$, kaikilla arvoilla $r = 1, 2, 3, \dots, B_{2r}$ on Bernoullin numerot parillisille indekseille.

Ekstrapolointimenetelmä

Newton-Cotesin kaavat perustuivat interpolaatiopolynomin integrointiin. Näiden kaavojen ongelma oli ettei tarkkuus parantunut kovinkaan nopeasti ja käyttökelpoisia uusia kaavoja ei voitu johtaa rajattomasti. Ekstrapoloimalla lasketaan puolisuunnikassäännöllä laske- tuista arvoista tarkempia arvoja rekursiokaavalla. Samalla virheen asteluku paranee. Edelli- sessä kappaleessa puolisuunnikassäännön virhe saatiin sarjamuotoon ja tätä hyödynämme seuraavaksi kun johdamme rekursiokaavan. Alkuperäisestä funktiosta ei lasketa uusia arvo- ja, vaan rekursiokaavassa käytetään puolisuunnikassäännöllä saatuja arvoja. Nyt ei yritetä laskea tarkempaa arvoa integraalille pisteitä lisäämällä, vaan eliminoimalla virhetermejä. Seuraavaksi katsotaan kuinka nämä virhetermit eliminoituvat ja saadaan ekstrapolointikaa- va johdettua.

Esimerkiksi, kun $k = 2$, saamme kaavan (4.1) seuraavaan muotoon

$$\int_a^b f(x) dx - T(m) = c_1 h^2 (f'(b) - f'(a)) - c_2 h^4 (f^3(b) - f^3(a)) - \underbrace{\left(\frac{h}{2}\right)^4 \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} z_4(t) f^4(x) dx}_{z_4(t)(f^3(b)-f^3(a))}.$$

Merkitään $c_1 (f'(b) - f'(a)) = C_1$ ja $h = \frac{b-a}{m}$ saadaan

$$\int_a^b f(x) dx - T(m) = C_1 h^2 + \mathcal{O}m^{-4}.$$

Jos lisätään osavälien määrää kahdella eli $2m$ ja $\frac{h}{2} = \frac{b-a}{2m}$, niin saadaan kaava seuraavaan muotoon

$$\int_a^b f(x) dx - T(2m) = C_1 (h/2)^2 + \mathcal{O}m^{-4}.$$

Ratkaistaan $\int_a^b f(x) dx$ eliminointia käytten seuraavasti

$$\begin{aligned} - \int_a^b f(x) dx &= -T(m) - C_1 h^2 - \mathcal{O}m^{-4} \\ 4 \int_a^b f(x) dx &= 4T(2m) + C_1 h^2 + 4\mathcal{O}m^{-4}. \end{aligned}$$

Kun lasketaan edelliset yhtälöt yhteen, niin $C_1 h^2$ kumoutuu ja saadaan seuraava yhtälö

$$\begin{aligned} 3 \int_a^b f(x) dx &= 4T(2m) - T(m) + 3\mathcal{O}m^{-4} \\ \int_a^b f(x) dx &= \frac{4T(2m) - T(m)}{3} + \mathcal{O}h^4. \end{aligned}$$

Puolisuunnikassäännön virheen asteluku oli $\mathcal{O}h^2$. Tällä menetelmällä pystyttiin parantamaan virheen astetta $\mathcal{O}h^4$ pisteitä lisäämättä. Tässä $T(m)$ ja $T(2m)$ tarkoittavat puolisuunnikassäännöllä laskettuja integraalin arvoja, jossa m ja $2m$ ovat osavälien määriä. Osavälien määrät on valittu näin, koska silloin voidaan hyödyntää jo laskettuja arvoja. Kun tuplataan osavälien määrä, lasketaan vain uudet arvot edellisten arvojen väliin. Tätä h^2 virhetermin eliminointia, kutsutaan **Richardsonin ekstrapolaatioksi**. Samalla tavoin voidaan eliminoida korkeampi asteisia termejä. Esimerkiksi, kun $k = 4$ saadaan kaava (4.1) seuraavaan muotoon

$$\int_a^b f(x) dx - T(m) = C_1 h^2 + C_2 h^4 + C_3 h^6 + \mathcal{O}h^8.$$

Eliminoidaan h^2 kuten edellä tapauksessa $k = 2$

$$\begin{aligned} - \int_a^b f(x) dx &= -T(m) - C_1 h^2 - C_2 h^4 - C_3 h^6 - \mathcal{O}m^{-8} \\ 4 \int_a^b f(x) dx &= 4T(2m) + C_1 h^2 + \frac{1}{4} C_2 h^4 + \frac{1}{16} C_3 h^6 + 4\mathcal{O}m^{-8}. \end{aligned}$$

Kun lasketaan yhtälöt yhteen, niin $C_1 h^2$ kumoutuu ja saadaan seuraava yhtälö

$$\begin{aligned} 3 \int_a^b f(x) dx &= 4T(2m) - T(m) - \frac{3}{4} C_2 h^4 - \frac{15}{16} C_3 h^6 + 3\mathcal{O}m^{-8} \\ \int_a^b f(x) dx &= \underbrace{\frac{4T(2m) - T(m)}{3}}_{T_1(m)} - \frac{1}{4} C_2 h^4 - \frac{5}{16} C_3 h^6 + \mathcal{O}h^{-8}. \end{aligned}$$

Toistetaan sama eliminointi menettely virhetermille $C_2 h^4$, kuin edellä tehtiin $C_1 h^2$ ja saadaan

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= T_1(m) - \frac{1}{4} C_2 h^4 - \frac{5}{16} C_3 h^6 + 3\mathcal{O}m^{-8} \\ \int_a^b f(x) dx &= T_1(2m) - \frac{1}{4} C_2 (h/2)^4 - \frac{5}{16} C_3 (h/2)^6 + \mathcal{O}m^{-8}. \end{aligned}$$

Valitaan sopivat kertoimet

$$\begin{aligned} - \int_a^b f(x) dx &= -T_1(m) + \frac{1}{4}C_2h^4 + \frac{5}{16}C_3h^6 - \mathcal{O}m^{-8} \\ 16 \int_a^b f(x) dx &= 16T_1(2m) - \frac{1}{4}C_2h^4 - \frac{5}{4}C_3h^6 + 16\mathcal{O}m^{-8} \end{aligned}$$

ja lasketaan yhtälöt yhteen, niin virhetermi C_2h^4 kumoutuu ja saadaan seuraava yhtälö

$$\int_a^b f(x) dx - \underbrace{\frac{16T_1(2m) - T_1(m)}{15}}_{T_2(m)} = -\frac{1}{16}C_3(h)^6 + \mathcal{O}m^{-8}.$$

Voisimme jatkaa toistamalla samaa menetelyä ja saisimme

$$\int_a^b f(x) dx - \underbrace{\frac{64T_2(2m) - T_2(m)}{63}}_{T_3(m)} = \mathcal{O}m^{-8}.$$

Kun edetään rekursiivisesti ja merkitään $T(m) = T_0(m)$, niin saadaan kaava ekstrapolointimenetelmälle, jota **Rombergin menetelmäksi** kutsutaan. Tällä saadaan approksimaatio integraalille $\int_a^b f(x) dx$ tarkkudella $\mathcal{O}h^{2k+2}$ olettaen, että $f^{(2k+2)}$ on olemassa ja on jatkuva välillä $[a, b]$.

$$(5.1) \quad T_k(m) = \frac{4^k T_{k-1}(2m) - T_{k-1}(m)}{4^k - 1}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Rombergin menetelmällä saadut välitulokset on loogista kirjata taulukoksi. Tätä taulukkoa kutsutaankin **Rombergin tauluksi**. Esimerkiksi voidaan valita välien määräksi aluksi $m = 2$, jolloin $h = (b - a)/2$. Tuplataan välien määrä jokaisella askeleella, jolloin voidaan käyttää hyväksi jo laskettuja arvoja. Aloitetaan laskemalla ensimmäiset arvot puolisuunnikkasäänöllä ja sitten edetään seuraavaan sarakkeeseen, joissa arvot on laskettu ekstrapoloimalla. Jokaisessa sarakkeessa integraalin tarkkuus paranee kahden asteen verran lisää eli virheen aste on $\mathcal{O}h^{2k+2}$.

TAULUKKO 1. Rombergin taulu.

m	$T(m)$	$T_1(m)$	$T_2(m)$	$T_3(m)$	$T_4(m)$
2	T(2)	$T_1(2)$	$T_2(2)$	$T_3(2)$	$T_4(2)$
4	T(4)	$T_1(4)$	$T_2(4)$	$T_3(4)$...
8	T(8)	$T_1(8)$	$T_2(8)$...	
16	T(16)	$T_1(16)$...		
32	T(32)	...			
...	...				
virhe	$\mathcal{O}h^2$	$\mathcal{O}h^4$	$\mathcal{O}h^6$	$\mathcal{O}h^8$	$\mathcal{O}h^{10}$

ESIMERKKI 5.1. Lasketaan integraali

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

Rombergin ekstrapolointimenetelmällä välillä $[0, 1]$. Lasketaan ensin integraalit puolisuunnikassäännöllä osavälien lukumäärille $m = 2, m = 4, m = 8$ ja $m = 16$. $\int_0^1 f(x) dx \approx T(m) = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{m-1}) + f(x_m)]$.

$$T(2) = \frac{1}{4} [f(0) + 2f(\frac{1}{2}) + f(1)] = 0,775$$

$$T(4) = \frac{1}{8} [f(0) + 2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{1}{2}) + 2f(\frac{3}{4}) + f(1)] = 0,7827941176$$

$$T(8) = \frac{1}{16} \left[f(0) + 2f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{1}{2}) + 2f(\frac{5}{8}) \right. \\ \left. + 2f(\frac{3}{4}) + 2f(\frac{7}{8}) + f(1) \right] = 0,7847471236$$

$$T(16) = \frac{1}{32} \left[f(0) + 2f(\frac{1}{16}) + 2f(\frac{1}{8}) + 2f(\frac{3}{16}) + 2f(\frac{1}{4}) + 2f(\frac{5}{16}) \right. \\ \left. + 2f(\frac{3}{8}) + 2f(\frac{7}{16}) + 2f(\frac{1}{2}) + 2f(\frac{9}{16}) + 2f(\frac{5}{8}) + 2f(\frac{11}{16}) \right. \\ \left. + 2f(\frac{3}{4}) + 2f(\frac{13}{16}) + 2f(\frac{7}{8}) + 2f(\frac{15}{16}) + f(1) \right] = 0,7852354030$$

Seuraavaksi käytetään Rombergin menetelmää (5.1)

$$T_1(m) = \frac{4T(2m) - T(m)}{3}$$

$$T_1(2) = \frac{4 \cdot 0,7827941176 - 0,775}{3} = 0,7853921569$$

$$T_1(4) = \frac{4 \cdot 0,7847471236 - 0,7827941176}{3} = 0,7853981256$$

$$T_1(8) = \frac{4 \cdot 0,7852354030 - 0,7847471236}{3} = 0,7853981628$$

$$T_2(m) = \frac{16T_1(2m) - T_1(m)}{15}$$

$$T_2(2) = \frac{16 \cdot 0,7853981652 - 0,7853981256}{15}$$

$$T_2(4) = \frac{16 \cdot 0,7853981628 - 0,7853981256}{15} = 0,7853981652$$

$$T_3(m) = \frac{64T_2(2m) - T_2(m)}{63}$$

$$T_3(2) = \frac{64 \cdot 0,7853981652 - 0,7853985235}{63} = 0,7853981596$$

Taulukosta 2 nähdään kuinka lasketun integraalin arvo tarkentuu. Puolisuunnikassäännöllä päästiin kolmen desimaalin tarkkuuteen eli $T(16) = 0,7852354030$, mutta ensimmäinen ekstrapolointi antaa tässä jo viiden desimaaliluvun tarkkuuden eli $T_1(2) = 0,7853921569$. Viimeinen luku taulukossa 2 on $T_3(2) = 0,7853981596$. Se näyttäisi olen seitsemän desimaalin tarkkuudella oikein, koska tiedämme tämän integraalin tarkan arvon, joka on $\frac{\pi}{4} \approx 0,785398163397$. Rombergin menetelmällä päästiin todella nopeasti hyvään tarkkuuteen.

TAULUKKO 2. Rombergin taulu integraalille $\int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx$.

m	$T(m)$	$T_1(m)$	$T_2(m)$	$T_3(m)$
2	0,775	0,7853921569	0,7853985235	0,7853981596
4	0,7827941176	0,7853981256	0,7853981652	
8	0,7847471236	0,7853981628		
16	0,7852354030			

ESIMERKKI 5.2. Lasketaan integraali

$$\int_0^3 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6 dx$$

Rombergin menetelmällä välillä $[0, 3]$. Lasketaan osavälin lukumäärillä $m = 2, m = 4, m = 8$ ja $m = 16$ integraalit puolisuunnikassäännöllä.

$$T(2) = \frac{1}{2} [f(0) + 2f(\frac{3}{2}) + f(3)] = 8027,71875$$

$$T(4) = \frac{4}{6} [f(0) + 2f(\frac{3}{4}) + 2f(\frac{3}{2}) + 2f(\frac{6}{4}) + f(3)] = 5964,69727$$

$$T(8) = 5426,249634$$

$$T(16) = 5290,21946$$

Seuraavaksi käytetään Rombergin menetelmää (5.1)

$$T_1(m) = \frac{4T(2m) - T(m)}{3}$$

$$T_1(2) = \frac{4 \cdot 5964,69727 - 8027,71875}{3} = 5277,02344$$

$$T_1(4) = \frac{4 \cdot 5426,249634 - 5964,69727}{3} = 5246,76709$$

$$T_1(8) = \frac{4 \cdot 5290,21946 - 5426,249634}{3} = 5244,87607$$

$$T_2(m) = \frac{16T_1(2m) - T_1(m)}{15}$$

$$T_2(2) = \frac{16 \cdot 5246,76709 - 5277,02344}{15} = 5244,75$$

$$T_2(4) = \frac{16 \cdot 5244,87607 - 5246,76709}{15} = 5244,75$$

$$T_3(m) = \frac{64T_2(2m) - T_2(m)}{63}$$

$$T_3(2) = \frac{64 \cdot 5244,75 - 5244,75}{63} = 5244,75$$

Taulukosta 3 nähdään kuinka lasketun integraalin arvo tarkentuu ja saadaan tarkka arvo integraalille taulukon kohdassa $T_2(2)$. Koska polynomien kuudes derivaatta on 0, niin virhetermiä $\mathcal{O}h^6$ ei ole.

TAULUKKO 3. Rombergin taulu integraalille $\int_0^3 30x^5 + 30x^4 + 5x^3 + x^2 + 3x + 6 dx$

m	$T(m)$	$T_1(m)$	$T_2(m)$	$T_3(m)$
2	8027,71875	5277,02344	5244,75	5244,75
4	5964,69727	5246,76709	5244,75	
8	5426,249634	5244,87607		
16	5290,21946			

Ekstrapoloissa on muistettava Euler-Macleurin määritelmässä vaaditut oletukset funktiolta, että funktio $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ on määritelty ja jatkuva välillä $[a, b]$ lisäksi sillä on jatkuvat derivaatat $2k$ -kertalukuun asti tällä välillä. Jos nämä oletukset ei täyty, niin eivät tulokset tule tarkemmiksi samalla tavalla kuten edellisissä esimerkeissä.

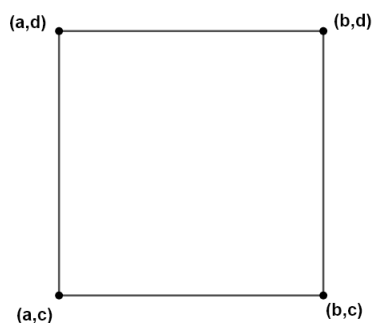
LUKU 6

Kaksiulotteisen integraalin laskeminen numeerisesti

Kaksiulotteinen integraali voidaan laskea soveltamalla yksiulotteista integrointia molempiin dimensioihin erikseen.

$$\int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy$$

Muuttujien arvot $x = a$, $x = b$, $y = c$, $y = d$ muodostavat suorakaiteen muotoisen pistealueen.



KUVA 6.1. Kaksiulotteinen integrointialue.

6.1. Puolisuunnikassäännöllä

Integroidaan ensin muuttujan x suhteen puolisuunnikassäännöllä saadaan

$$I = \frac{b-a}{2} \int_c^d [f(a, y) + f(b, y)] dy.$$

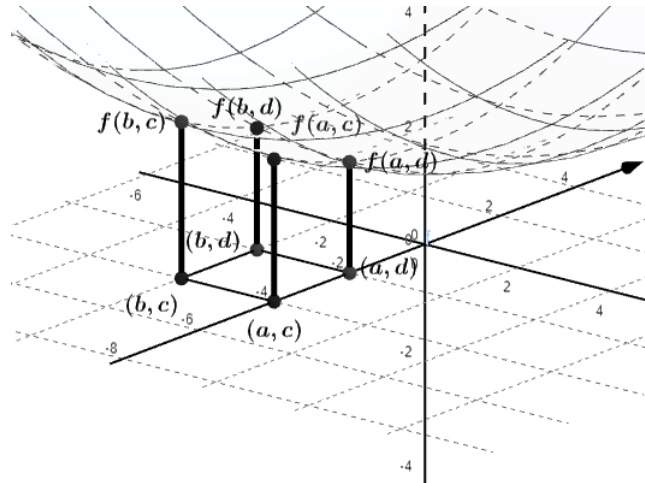
Sitten tehdään sama muuttujan y suhteen

$$= \frac{(b-a)(d-c)}{2} [f(a, c) + f(b, c) + f(a, d) + f(b, d)].$$

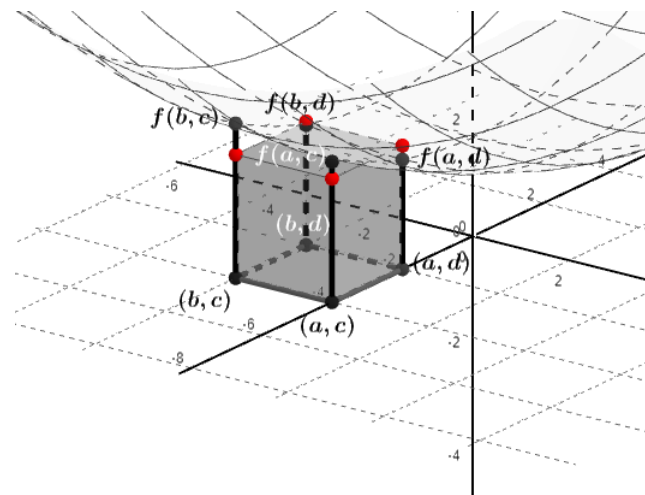
Kaksiulotteinen integraali puolisuunnikassäännöllä laskettuna on

$$I = \frac{(b-a)(d-c)}{4} [f(a, c) + f(a, d) + f(b, c) + f(b, d)].$$

Pisteet (a, c) , (a, d) , (b, c) , (b, d) ovat suorakulmion kulmia ja $(b-a)(d-c)$ sen pinta-ala. Kulmapisteiden arvoista lasketaan keskiarvo eli $\frac{f(a,c)+f(a,d)+f(b,c)+f(b,d)}{4}$ ja sillä kerrotaan suorakulmion ala.



KUVA 6.2. Kulmapisteet ja niitä vastaavat funktion arvot.



KUVA 6.3. Puolisuunnikassäännöllä on saatu arvio kaksiulotteiselle integraalille, joka on näin syntyvän suorakulmaisen särmiön tilavuus. Särmiön pohja on integroimisalue ja korkeus on keskiarvo funktion arvoista integroimisalueen kulmapisteissä.

6.2. Yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä

Kuten yksiulotteisessakin tapauksessa jaamme välin $[a, b]$ useaan osaväliin $i = 0, 1, 2, \dots, m$,

$$[a, b] = [x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{m-2}, x_{m-1}], [x_{m-1}, x_m],$$

joihin sovelletaan puolisuunnikassääntöä erikseen. Osavälin pituus $h = (b - a)/m$.

Samoin tehdään välille $[c, d]$ ja jaetaan se useaan osaväliin $j = 0, 1, 2, \dots, n$,

$$[c, d] = [y_0, y_1], [y_1, y_2], \dots, [y_{n-2}, y_{n-1}], [y_{n-1}, y_n],$$

joihin sovelletaan puolisuunnikassääntöä erikseen. Osavälin pituus $k = (d - c)/n$.

$$\int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy = \sum_{j=1}^n \int_{y_{j-1}}^{y_j} \sum_{i=1}^m \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x, y) dx dy$$

Integroidaan yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä ensin muuttujan x suhteen ja saadaan

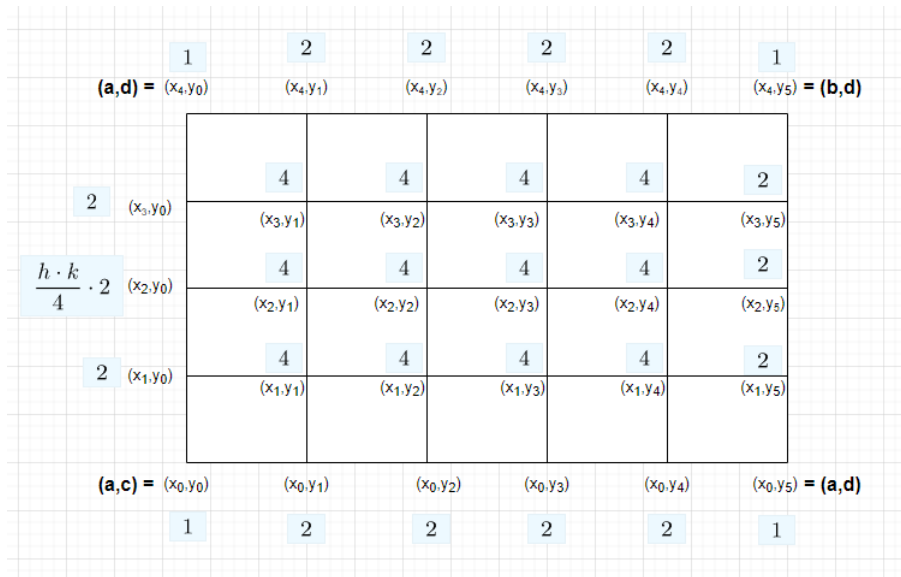
$$I = \sum_{j=1}^n \int_{y_{j-1}}^{y_j} \frac{h}{2} \underbrace{[f(x_0, y) + 2f(x_1, y) + \dots + 2f(x_{m-1}, y) + f(x_m, y)]}_{g(y)} dy.$$

Tehdään apufunktio $g(y)$ ja integroidaan yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä muuttujan y suhteen ja saadaan

$$\begin{aligned} &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} [g(y_0) + 2g(y_1) + \dots + 2g(y_{n-1}) + g(y_n)] \\ &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} \left[g(y_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} g(y_j) + g(y_n) \right]. \end{aligned}$$

Kaksiulotteinen integraali yhdistetyllä puolisuunnikassäännöllä laskettuna on

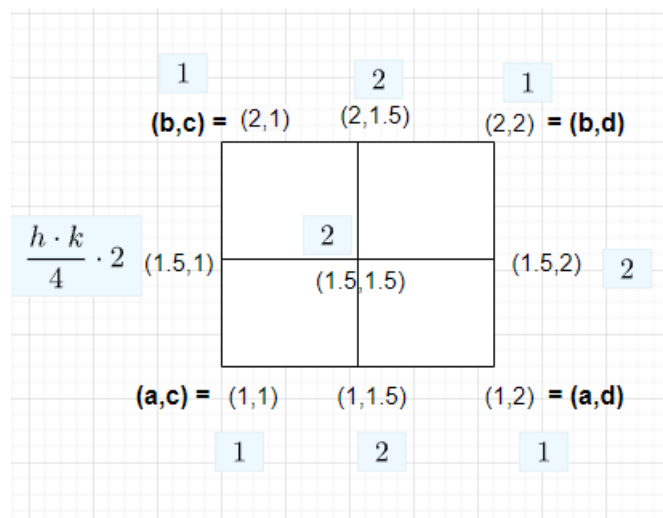
$$\begin{aligned} I &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} \left[f(x_0, y_0) + 2f(x_1, y_0) + \dots + 2f(x_{m-1}, y_0) + f(x_m, y_0) \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \left(f(x_0, y_j) + 2f(x_1, y_j) + \dots + 2f(x_{m-1}, y_j) + f(x_m, y_j) \right) \right. \\ &\quad \left. + f(x_0, y_n) + 2f(x_1, y_n) + \dots + 2f(x_{m-1}, y_n) + f(x_m, y_n) \right]. \end{aligned}$$



KUVA 6.4. Integrointialue on jaettu pisteisiin (x_m, y_n) . Näissä pisteissä integroitavan funktion arvot lasketaan. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle, joiden mukaisesti arviot kaavassa huomioidaan.

HUOMAUTUS 6.1. Yhdistetty puolisuunnikkasääntö integroi täsmälleen $n \leq 1$ asteisen polynomin. Rombergin menetelmää voimme käyttää, jos välien pituudet ovat samat eli $h = k$

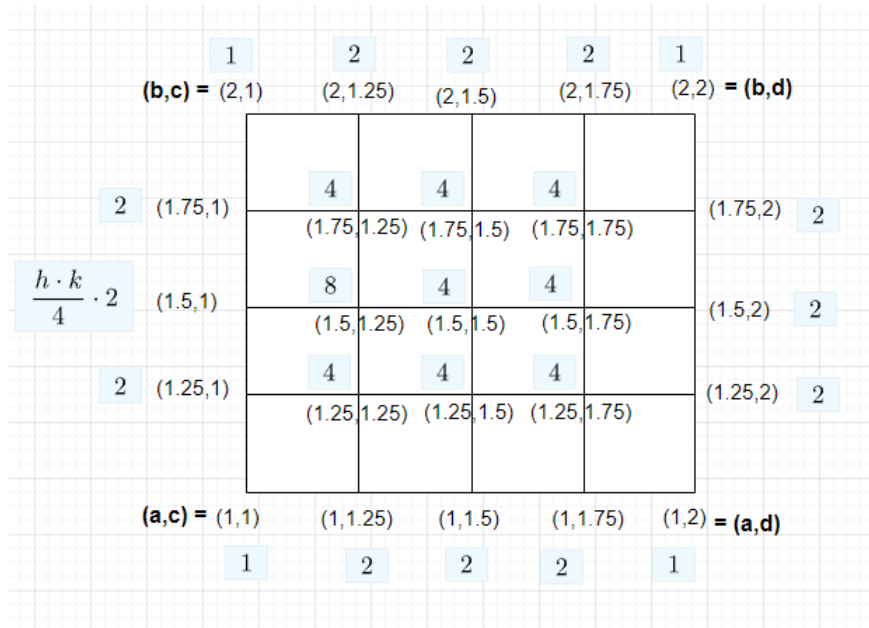
ESIMERKKI 6.1. Lasketaan integraali $\int_1^2 \int_1^2 \frac{1}{y+x^2} dx dy$ yhdistetyllä puolisuunnikkasäännöllä. Käytetään välinpituuksia $k = h = 0,5$ ja $h = k = 0,25$ niin voidaan parantaa tarkkuutta Rombergin menetelmällä. Koska tarkka-arvo integraalille on 15 desimaalilla $0,2768808293764136$, voidaan arvioida tarkasti myös virheen suuruutta. Kuvassa (6.5) integrintialue on jaettu välin pituudella $k = h = 0,5$. Sitten näille pisteille lasketaan funktion arvot ja ne sijoitetaan kaavaan.



KUVA 6.5. Integrintialue jaettu tasaväliseen pisteistöön. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle.

$$\begin{aligned}
 T(0,5) &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} \left[f(1,1) + 2f\left(\frac{1}{2},1\right) + f(2,1) \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left[f\left(1,\frac{1}{2}\right) + 2f\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right) + f\left(2,\frac{1}{2}\right) \right] + f(1,2) + 2f\left(\frac{1}{2},2\right) + f(2,2) \right] \\
 &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} \left[\frac{1}{2} + 2\frac{4}{13} + \frac{1}{5} + 2 \left[\frac{2}{5} + 2\frac{4}{15} + \frac{4}{14} \right] + \frac{1}{3} + 2\frac{4}{17} + \frac{1}{6} \right] \\
 &= \frac{82343}{291720} \approx 0,28226724256
 \end{aligned}$$

Sitten lasketaan välin pituudella $h = k = 0,25$. Tällöin pisteet ovat kuvan (6.6) mukaiset.



KUVA 6.6. Integrointialue jaettu tasaväliseen pisteistöön. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle.

$$\begin{aligned}
 T(0,25) &= \frac{k}{2} \frac{h}{2} \left[f(1,1) + 2f\left(\frac{5}{4},1\right) + 2f\left(\frac{3}{2},1\right) + 2f\left(\frac{7}{4},1\right) + f(2,1) \right. \\
 &\quad + 2 \left[f\left(1,\frac{5}{4}\right) + 2f\left(\frac{5}{4},\frac{5}{4}\right) + 2f\left(\frac{3}{2},\frac{5}{4}\right) + 2f\left(\frac{7}{4},\frac{5}{4}\right) + f\left(2,\frac{5}{4}\right) \right. \\
 &\quad + f\left(1,\frac{3}{2}\right) + 2f\left(\frac{5}{4},\frac{3}{2}\right) + 2f\left(\frac{3}{2},\frac{3}{2}\right) + 2f\left(\frac{7}{4},\frac{3}{2}\right) + f\left(2,\frac{3}{2}\right) \\
 &\quad + f\left(1,\frac{7}{4}\right) + 2f\left(\frac{5}{4},\frac{7}{4}\right) + 2f\left(\frac{3}{2},\frac{7}{4}\right) + 2f\left(\frac{7}{4},\frac{7}{4}\right) + f\left(2,\frac{7}{4}\right) \left. \right] \\
 &\quad + f(1,2) + 2f\left(\frac{5}{4},2\right) + 2f\left(\frac{3}{2},2\right) + 2f\left(\frac{7}{4},2\right) + f(2,2) \left. \right] \\
 &\approx 0,278197548048
 \end{aligned}$$

HUOMAUTUS 6.2. Rombergin menetelmä parantaa tätä tarkuutta vielä lisää

$$\begin{aligned}
 T_1 &= \frac{1}{3} [4T(0,25) - T(0,5)] \\
 &= \frac{1}{3} [4 \cdot 0,278197548048 - 0,28226724256] \\
 &= \frac{522820707109871}{1888523516447568} \approx 0,2768409832106988
 \end{aligned}$$

Saatujen tulosten virheet ovat seuraavat:

Kun väli on $h = k = 0,5$, puolisuunnikassäännöllä virhe on

$$|0,2768808294 - 0,2822672426| = 0,0053864132$$

Kun väli on $h = k = 0,25$, puolisuunnikassäännöllä virhe on

$$|0,2768808294 - 0,2781975480| = 0,0013167186$$

Rombergin menetelmällä laskettu virhe on

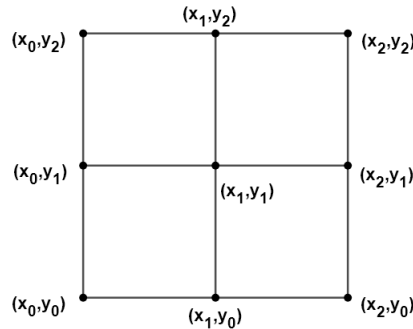
$$|0,2768808294 - 0,2768409832| = 0,0000398462$$

6.3. Simpsonin 1/3-säännöllä

Lasketaan kaksiulotteinen integraali Simpsonin 1/3-säännöllä. Sovelletaan molempiin dimensioihin Simpsonin 1/3-sääntöä erikseen.

$$\int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy$$

Välit $[a, b]$ ja $[c, d]$ jaetaan kahteen väliin. Merkitään $x_0 = a$, $x_1 = (b - a)/2$, $x_2 = b$ ja $y_0 = c$, $y_1 = (d - c)/2$, $y_2 = d$. Välien pituudet ovat $k = (d - c)/2$ ja $h = (b - a)/2$. Näistä muodostuu kuvan mukainen ristikko, jossa on yhdeksän kulmapistettä.



KUVA 6.7. Kaksiulotteinen integrointialue on jaettu Simpsonin 1/3-säännön mukaisesti.

Integroidaan ensin muuttujan x suhteen Simpsonin 1/3-säännöllä saadaan

$$= \frac{h}{3} \int_c^d [f(x_0, y) + 4f(x_1, y) + f(x_2, y)] dy.$$

Integroidaan seuraavaksi muuttujan y suhteen. **Kaksiulotteinen integraali Simpsonin 1/3-säännöllä** on

$$I = \frac{h}{3} \frac{k}{3} \left[f(x_0, y_0) + 4f(x_1, y_0) + f(x_2, y_0) + 4[f(x_0, y_1) + 4f(x_1, y_1) + f(x_2, y_1)] + f(x_0, y_2) + 4f(x_1, y_2) + f(x_2, y_2) \right].$$

6.4. Yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä

Kun lasketaan yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä, jaetaan välin $[a, b]$ useaan osaväliin $i = 0, 1, 2, \dots, m$,

$$[a, b] = [x_0, x_1, x_2], [x_2, x_3, x_4], \dots, [x_{m-4}, x_{m-3}, x_{m-2}], [x_{m-2}, x_{m-1}, x_m],$$

joihin sovelletaan Simpsonin 1/3-sääntöä erikseen ja osavälin pituus $h = (b - a)/2m$. Samoin tehdään välille $[c, d]$ ja jaetaan useaan osaväliin $j = 0, 1, 2, \dots, n$,

$$[a, b] = [x_0, x_1, x_2], [x_2, x_3, x_4], \dots, [x_{m-4}, x_{m-3}, x_{m-2}], [x_{m-2}, x_{m-1}, x_m],$$

joihin sovelletaan Simpsonin 1/3-sääntöä erikseen. Osavälin pituus $k = (d - c)/2n$ ja

$$\int_c^d \left(\int_a^b f(x, y) dx \right) dy = \sum_{j=1}^n \int_{y_{2j-2}}^{y_{2j}} \sum_{i=1}^m \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x, y) dx dy.$$

Integroidaan yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä ensin muuttujan x suhteen ja saadaan

$$I = \sum_{j=1}^n \int_{y_{2j-2}}^{y_{2j}} \frac{h}{3} \left[f(x_0, y) + 4f(x_1, y) + 2f(x_2, y) + 4f(x_4, y) + \dots + 2f(x_{2m-2}, y) + 4f(x_{2m-1}, y) + f(x_{2m}, y) \right] dy$$

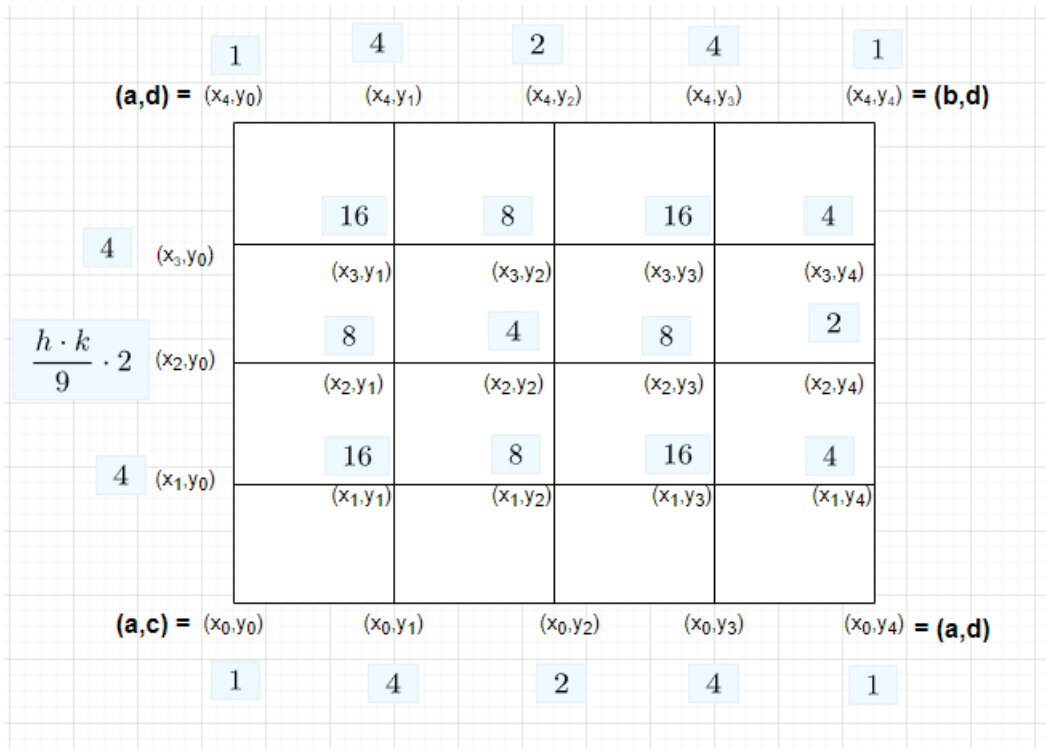
Merkitään $g(y) = [f(x_0, y) + 4f(x_1, y) + 2f(x_2, y) + 4f(x_4, y) + \dots + 2f(x_{2m-2}, y) + 4f(x_{2m-1}, y) + f(x_{2m}, y)]$ ja integroidaan yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä muuttujan y suhteen

$$= \frac{h}{3} \sum_{j=1}^n \int_{y_{2j-2}}^{y_{2j}} g(y) dy = \frac{k}{3} \frac{h}{3} \left[g(y_0) + 4g(y_1) + 2g(y_2) + 4g(y_3) + \dots + 2g(y_{2n-2}) + 4g(y_{2n-1}) + g(y_{2n}) \right].$$

Merkitään $g(y_j) = [f(x_0, y_j) + 4f(x_1, y_j) + 2f(x_2, y_j) + 4f(x_4, y_j) + \dots + 2f(x_{2m-2}, y_j) + 4f(x_{2m-1}, y_j) + f(x_{2m}, y_j)]$.

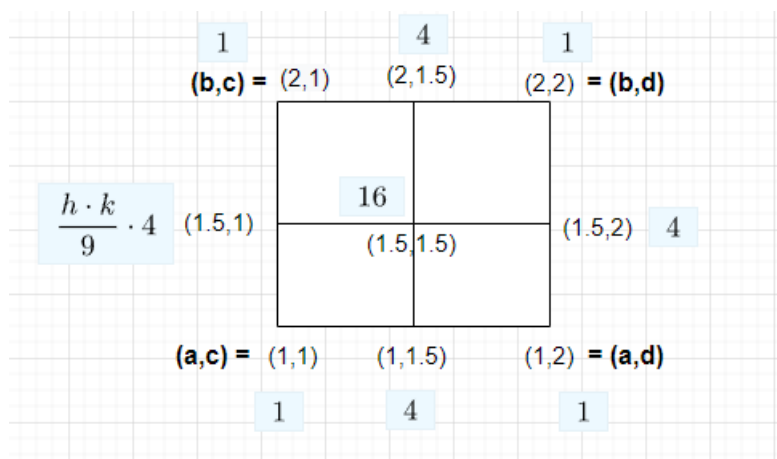
Kaksiulotteinen integraali yhdistetyllä Simpsonin 1/3-säännöllä laskettuna on

$$\begin{aligned}
I = \frac{k}{3} \frac{h}{3} & \left[f(x_0, y_0) + 4f(x_1, y_0) + 2f(x_2, y_0) + 4f(x_{2m-1}, y_0) + f(x_{2m}, y_0) \right. \\
& + 4 \sum_{j=1,3,5,\dots}^{2n-1} (f(x_0, y_j) + 4f(x_1, y_j) + 2f(x_2, y_j) + \dots + 4f(x_{2m-1}, y_j) + f(x_{2m}, y_j)) \\
& + 2 \sum_{j=2,4,6,\dots}^{2n-2} (f(x_0, y_j) + 4f(x_1, y_j) + 2f(x_2, y_j) + \dots + 4f(x_{2m-1}, y_j) + f(x_{2m}, y_j)) \\
& \left. + f(x_0, y_{2n}) + 4f(x_1, y_{2n}) + 2f(x_2, y_{2n}) + \dots + 4f(x_{2m-1}, y_{2n}) + f(x_{2m}, y_{2n}) \right].
\end{aligned}$$



KUVA 6.8. Integraali-alue jaettu tasaväliseen pisteistöön. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle.

ESIMERKKI 6.2. Lasketaan integraali $\int_1^2 \int_1^2 \frac{1}{y+x^2} dx dy$ Simpsonin 1/3-säännöllä. Käytetään välin pituuksia $k = h = 0,5$ ja $h = k = 0,25$. Näin voimme verrata edellisen esimerkin tuloksiin. Lasketaan ensin välin pituudella $k = h = 0,5$. Tällöin pisteistö on kuvan (6.9) mukainen

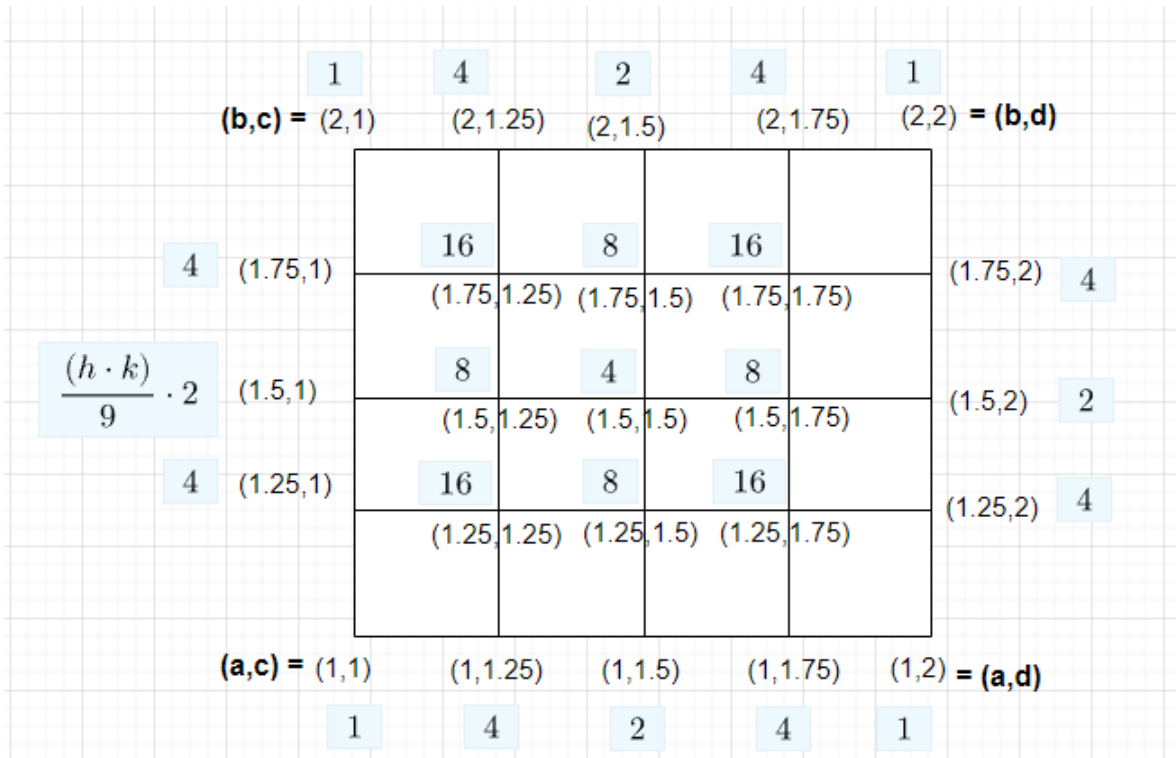


KUVA 6.9. Integrointialue jaettu tasaväliseen pisteistöön. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle.

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{k}{3} \frac{h}{3} \left[f(1, 1) + 4f\left(\frac{1}{2}, 1\right) + f(2, 1) \right. \\
 &\quad \left. + 4 \left[f\left(1, \frac{1}{2}\right) + 4f\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) + f\left(2, \frac{1}{2}\right) \right] + f(1, 2) + 4f\left(\frac{1}{2}, 2\right) + f(2, 2) \right] \\
 &= \frac{k}{3} \frac{h}{3} \left[\frac{1}{2} + 4\frac{4}{13} + \frac{1}{5} + 4 \left[\frac{2}{5} + 4\frac{4}{15} + \frac{4}{14} \right] + \frac{1}{3} + 4\frac{4}{17} + \frac{1}{6} \right] \\
 &= \frac{181703}{656370} \approx 0,276830141536024
 \end{aligned}$$

Sitten lasketaan välin pituudella $h = k = 0,25$. Tällöin pisteistö on kuvan (6.10) mukainen. Pisteistö on sama kuin edellisen esimerkin kuvassa (6.9). Mutta painokertoimet pisteille on nyt aivan erilaiset.

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{k}{3} \frac{h}{3} \left[f(1, 1) + 4f\left(\frac{5}{4}, 1\right) + 2f\left(\frac{3}{2}, 1\right) + 4f\left(\frac{7}{4}, 1\right) + f(2, 1) \right. \\
 &\quad \left. + 4 \left[f\left(1, \frac{5}{4}\right) + 2f\left(\frac{5}{4}, \frac{5}{4}\right) + 4f\left(\frac{3}{2}, \frac{5}{4}\right) + 2f\left(\frac{7}{4}, \frac{5}{4}\right) + f\left(2, \frac{5}{4}\right) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + f\left(1, \frac{7}{4}\right) + 4f\left(\frac{5}{4}, \frac{7}{4}\right) + 2f\left(\frac{3}{2}, \frac{7}{4}\right) + 4f\left(\frac{7}{4}, \frac{7}{4}\right) + f\left(2, \frac{7}{4}\right) \right] \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left[f\left(1, \frac{3}{2}\right) + 4f\left(\frac{5}{4}, \frac{3}{2}\right) + 2f\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) + 4f\left(\frac{7}{4}, \frac{3}{2}\right) + f\left(2, \frac{3}{2}\right) \right] \right. \\
 &\quad \left. + f(1, 2) + 4f\left(\frac{5}{4}, 2\right) + 2f\left(\frac{3}{2}, 2\right) + 4f\left(\frac{7}{4}, 2\right) + f(2, 2) \right] \\
 &\approx 0,276874716523485
 \end{aligned}$$



KUVA 6.10. Integrintialue jaettu tasaväliseen pisteistöön. Kuvassa on myös painokertoimet jokaiselle pisteelle.

Saatujen tulosten virheet olivat seuraavat (edellisen esimerkin tulokset):

Kun väli on $h = k = 0,5, 1/3$ Simpsonin säännöllä virhe on

$$|0,2768808294 - 0,2768301415| = 0,0000506879 \quad (0,0053864132)$$

Kun väli on $h = k = 0,25, 1/3$ Simpsonin säännöllä virhe on

$$|0,2768808294 - 0,2768747165| = 0,0000061129 \quad (0,0013167186)$$

Verrattuna edellisen esimerkin puolisuunnikassäännöllä laskettuihin arvoihin saatiin reilusti tarkemmat arvot. Molemmissa esimerkeissä oli sama pisteistö, joten tässä oli suuri merkitys että millä menetelmällä laskettiin.

Kirjallisuutta

- [1] S.R.K.IYENGAR ja R.K. JAIN: *Numerical methods*. New Age International (P) Ltd., Publishers, 2009
- [2] ERNST LINDELÖF: *Johdatus korkeampaan analyysiin*. toinen, korjattu laitos, Mercatorin Kirjapaino Osakeyhtiö, 1926.
- [3] E. SULI ja D. F. MAYERS: *An introduction to numerical analysis*, Cambridge University Press, 2003
- [4] BARTLE, ROBERT G, SHERBERT ja DONALD R.: *Introduction to real analysis*, John Wiley & Sons Inc, 1992
- [5] BOYER, CARL B., MERZBACH, UTA C. ja PIETILÄINEN, KIMMO: *Tieteiden kuningatar : matematiikan historia. Osa 2*. Art House 1994