TAMPEREEN YLIOPISTO
Pro gradu -tutkielma

Anniina Julku

Newton-Cotesin ja Gaussin integrointimenetelmistä

Informaatiotieteiden yksikkö
Matematiikka
Toukokuu 2015

Tampereen yliopisto

Informaatiotieteiden yksikkö

JULKU, ANNIINA: Newton-Cotesin ja Gaussin integrointimenetelmistä

Pro gradu -tutkielma, 37 s.

Matematiikka

Toukokuu 2015

Tiivistelmä

Tämä tutkielma käsittelee numeerisen integroinnin kahta integrointimenetelmää, Newton-Cotesin ja Gaussin integrointimenetelmiä. Graafisesti integrointi tarkoittaa tietyn käyrän ja x-akselin väliin jäävän pinta-alan määrittämistä integrointivälin päätepisteiden välissä, kun käyrää vastaava funktio on positiivinen.

Newton-Cotesin integrointimenetelmä on yleisin numeerisista integrointimenetelmistä. Menetelmä perustuu siihen, että hankalasti integroitava funktio korvataan approksimoidulla funktiolla, joka on helppo integroida. Kun tarkastellaan integrointivälin tasavälistä jakoa ja käytetään Lagrangen interpolaatiokaavaa, approksimoidulle polynomille saadaan johdettua summalauseke painoineen ja pisteineen. Eri painot vastaavat Newton-Cotesin kaavoja. Yleensä Newton-Cotesin kaavoja ei sovelleta koko integrointivälille, vaan yksitellen osaväleillä, joihin integrointiväli on jaettu. Kun integraalia arvioidaan osavälien approksimaatioiden summalla, saadaan yhdistettyjä sääntöjä.

Gaussin integrointimenetelmässä integraali on esitetty painofunktion ja funktion tulona. Integrointiväliä ei kuitenkaan jaeta tasaisiin väleihin, sillä päästään parempiin tuloksiin, jos pisteet valitaan tarkan integroitumisen kannalta optimaalisella tavalla. Ennen Gaussin integrointisääntöjen muotoilua käydään läpi keskeisiä tuloksia painofunktioista, ortogonaalisista polynomeista ja tridiagonaalimatriiseista. Painofunktio ja skalaaritulo määritellään, ja käydään läpi ortogonaalisiin polynomeihin liittyviä lauseita, jotka karakterisoivat painoja ja pisteitä. Lopuksi tarkastellaan Gaussin integrointikaavoja etukäteen kiinnitetyillä luvuilla ja painoilla. Näin saadaan säännöt Radaun ja Lobatton integroinnille.

Tärkeimmät viitekirjat työssä ovat J. Stoerin ja R. Bulirschin Introduction to Numerical Analysis ja P. J. Davisin ja P. Rabinowitzin Methods of Numerical Integration.

Sisältö

1 Johdanto **4**

2 Esitietoja **6**

3 Newton-Cotesin integrointimenetelmistä **11**
3.1 Newton-Cotesin kaavoista 11
3.2 Yhdistetyistä säännöistä 17

4 Gaussin integrointimenetelmistä **20**
4.1 Painofunktioista 20
4.2 Perustuloksia ortogonaalisista polynomeista 21
4.3 Tridiagonaalimatriiseista 28
4.4 Gaussin integrointikaavoista etukäteen määrätyillä luvuilla . . 31

Viitteet **37**

1 Johdanto

Olkoon $f(x)$ jokin annettu reaalinen funktio. Kyseisen funktion määrätyn integraalin

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

arvon laskeminen on klassinen ongelma. Voimme esittää joidenkin yksinkertaisten integrandien $f(x)$ integraalin

$$\int_a^x f(x)\,dx = F(x), \quad \text{missä } F'(x) = f(x),$$

suljetussa muodossa, muuttujan x algebrallisena esityksenä ja tunnettuina alkeisfunktioina. Tällöin saamme integraalille tarkan arvon laskemalla

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a), \tag{1.1}$$

missä $F(x)$ on funktion $f(x)$ määräämätön integraali (antiderivaatta). Jos määräämätön integraali on helposti saatavissa ja riittävän yksinkertainen, kaavalla (1.1) voimme saada erittäin nopeita laskutoimituksia. Usein integrointi johtaa kuitenkin uusiin alkeisfunktioihin. Esimerkiksi integroimalla lausekkeen funktion

$$\int \frac{1}{x}\,dx$$

saamme logaritmin, mikä ei ole algebrallinen funktio, vaikka se onkin alkeisfunktio. Toisaalta integroimalla funktion

$$\int e^{-x^2}\,dx,$$

saamme funktion, jota emme voi esittää alkeisfunktioiden avulla. Vaikka määräämätön integraali olisi alkeisfunktio ja saisimme sen ilman kohtuutonta työmäärää, sen lauseke voi olla niin pitkä ja monimutkainen, että keskeytämme laskemisen ennen kaavan (1.1) soveltamista. Näiden syiden takia arvioimme usein integraaleja. (Vrt. [2, s. 2]).

Yleensä laskemme määrättyjä integraaleja arvioimalla integraalia äärellisillä summilla siten, että summat vastaavat integrointivälin $[a, b]$ jakoa. Simpsonin sääntö on tyypillinen esimerkki edellä mainitusta menetelmästä, ja se on yhä parhaiten tunnetttu ja eniten käytetty integrointimenetelmä Newton-Cotesin kaavoista. (Vrt. [6, s. 117]).

Tässä pro gradu -tutkielmassa tarkastelemme Newton-Cotesin ja Gaussin integrointimenetelmiä. Luvussa 2 esitämme interpolaation perusidean sekä Lagrangen ja Hermiten interpolaatiokaavat lauseina. Luvussa 3 esitämme muutamia Newton-Cotesin integrointisääntöjä koko integrointivälille ja sen osaväleille. Luvussa 4 määrittelemme painofunktion, skalaaritulon, ortogonaalisuuden ja todistamme keskeisiä tuloksia ortogonaalisista polynomeista. Lopuksi esitämme Gaussin integrointisääntöjen erikoistapauksia sekä Lobatton ja Radaun integroinnin.

Edellytämme lukijalta joidenkin analyysin, diskreetin matematiikan ja lineaarialgebran perusasioiden tuntemista. Edellytämme muun muassa, että lukija tuntee yhden muuttujan differentiaali- ja integraalilaskennan perusteet. Pääasiallisina lähdeteoksina käytämme J. Stoerin ja R. Bulirschin *Introduction to Numerical Analysis* -kirjaa ja P. J. Davisin ja P. Rabinowitzin *Methods of Numerical Integration* -kirjaa.

2 Esitietoja

Käymme tässä luvussa läpi pro gradu -tutkielmassa käytettäviä merkintöjä sekä Lagrangen ja Hermiten interpolaatiokaavat. (Vrt. [6, s. 38–39, s. 49, s. 52–53, s. 56]).

Esitämme aluksi muutaman merkinnän huomatuksina.

Huomautus 2.1. Merkitsemme symbolilla Π_n kaikkien polynomien P,

$$P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n,$$

joukkoa, joiden aste on korkeintaan n.

Huomautus 2.2. Käytämme merkintää

$$\bar{\Pi}_n := \{P \mid P(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_{n-1} x^{n-1} + x^n\}$$

astetta n olevien normeerattujen polynomien joukolle. Normeeraamme polynomit P siten, että polynomin korkeimman asteen termin kerroin on 1.

Huomautus 2.3. Merkinnällä ":=" tarkoitamme "on määritelmän mukaan". Merkinnällä "$\equiv$" tarkoitamme, että "ovat yhtäpitäviä (ekvivalentteja)". Olkoot p ja q lauseita. Nyt lause $p := q$ tarkoittaa, että p on määritelmän mukaan q. Lause $p \equiv q$ tarkoittaa, että p on yhtäpitävä lauseen q kanssa.

Huomautus 2.4. Merkinnällä $V = C^n[a, b]$ tarkoitamme funktioiden, joilla on jatkuva n:s derivaatta välillä $[a, b]$, muodostamaa joukkoa. Merkinnällä $C[a, b]$ tarkoitamme jatkuvien funktioiden joukkoa.

Huomautus 2.5. Merkinnällä $I[x_0, \ldots, x_n, \bar{x}]$ tarkoitamme pienintä väliä, joka sisältää luvut $x_0, \ldots, x_n$ ja $\bar{x}$.

Määrittelemme seuraavaksi, mitä tarkoitamme integrointimenetelmän kertaluvulla. Voimme tarkastella kertalukua polynomien integrointitarkkuuden tai virhearvion avulla. Esitämme seuraavaksi määritelmän kertaluvusta, joka perustuu virhearvioon ja jota käytämme jatkossa tarkastellessamme Newton-Cotesin yhdistettyjä sääntöjä (ks. luku 3.2).

Määritelmä 2.1. Jos osavälien jakamiseen perustuvan yhdistetyn säännön virhe on suuruusluokkaa $\mathcal{O}(h^r)$, mutta ei suuruusluokkaa $\mathcal{O}(h^{r+1})$, sanomme, että kyseenomaisen menetelmän *kertaluku* on r. (Vrt. [3, s. 10–12]).

Yleisesti, jos $r = m + 1$, numeerinen sääntö integroi osaväleillä tarkasti polynomin, jonka aste on m, mutta ei polynomia astetta $m + 1$. Tällöin menetelmän kertaluku on m, ja kertaluku perustuu integrointitarkkuuteen. Käytämme tätä määritelmää kertaluvulle luvussa 4.1.

Ennen käytimme polynomien interpolaatiota, kun interpoloimme taulukoista kerättyjen funktioiden arvoja. Menetelmällä arvioimme annettua funktiota annetulla välillä. Nykyisten tietokoneiden aikakaudella meillä ei ole enää tarvetta käyttää taulukoituja funktioiden arvoja. Kuitenkin polynomien interpolaatio on tärkeä teoreettinen pohja useille numeerisen integroinnin kaavoille, joten käymme seuraavaksi läpi interpolaation perusidean ja muutamia interpolaatiokaavoja.

Tarkoitamme polynomien interpolaatiolla polynomin sovitusta dataan. Olkoot annettu datapisteet

$$x_0, x_1, \dots, x_{n-1},$$
$$y_0, y_1, \dots, y_{n-1}.$$

Kun haluamme sovittaa polynomin dataan, meidän on valittava korkeintaan $(n-1)$:ttä astetta oleva polynomi, jolle

$$p(x_k) \approx y_k, \quad \text{missä } k = 0, \dots, n-1. \tag{2.1}$$

Jos vaadimme, että yllä oleva ehto toteutuu täsmällisesti, kyseessä on interpolaatiotehtävä. Jos pisteet x_k ovat erillisiä, saamme yksikäsitteisen ratkaisun.

Esitämme seuraavaksi lauseen, jonka mukaan voimme ratkaista interpolaatio-ongelman aina polynomien avulla.

Lause 2.1 (Lagrangen interpolaatiokaava)**.** *Olkoot $n+1$ kappaletta pistepareja*

$$(x_i, f_i), \quad \textit{missä } i = 0, \dots, n, \quad x_i \neq x_k \textit{ jokaisella } i \neq k.$$

Näitä pistepareja kohti on olemassa yksikäsitteinen polynomi $P \in \Pi_n$, jolle

$$P(x_i) = f_i, \quad \textit{missä } i = 0, \dots, n.$$

Todistus. Todistamme ensin yksikäsitteisyyden. Olkoot $P_1, P_2 \in \Pi_n$ kaksi mielivaltaista polynomia, joille on voimassa

$$P_1(x_i) = P_2(x_i) = f_i, \quad \text{missä } i = 0, \dots, n.$$

Polynomin $P := P_1 - P_2 \in \Pi_n$ aste on korkeintaan n, ja sillä on vähintään $n+1$ eri nollakohtaa, nimittäin x_i, missä $i = 0, \dots, n$. Jos polynomi ei ole identtisesti nolla, algebran peruslauseesta seuraa, että polynomin juurien määrä on korkeintaan polynomin asteen verran. Polynomin P aste on korkeintaan n, mutta sillä on nollakohtia $n+1$ kappaletta, missä on ristiriita. Täten polynomin P täytyy olla identtisesti nolla, jolloin $P_1 = P_2$.

Todistamme seuraavaksi olemassaolon. Konstruoimme interpoloivan polynomin P eksplisiittisesti polynomien $L_i \in \Pi_n$, missä $i = 0, \dots, n$, avulla, joille on voimassa

$$L_i(x_k) = \delta_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{jos } i = k, \\ 0, & \text{jos } i \neq k. \end{cases} \tag{2.2}$$

Seuraavat *Lagrangen polynomit*

$$L_i(x) :\equiv \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} \equiv \frac{\omega(x)}{(x-x_i)\omega'(x_i)}, \tag{2.3}$$

missä

$$\omega(x) :\equiv \prod_{i=0}^{n}(x-x_i),$$

täyttävät ehdon (2.2). Huomautamme, että tähän astinen todistus osoittaa ainoastaan sen, että ehto (2.2) määrää yksikäsitteisesti Lagrangen polynomit. Voimme nyt ilmaista interpolaatio-ongelman ratkaisun P suoraan polynomien L_i termien avulla, jolloin

$$P(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x-x_k}{x_i-x_k}.$$

□

Määritelmä 2.2. Sanomme lauseessa 2.1 esiintyvä kaavaa

$$P(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{x-x_k}{x_i-x_k}. \tag{2.4}$$

Lagrangen interpolaatiokaavaksi.

Lagrangen interpolaatiokaava osoittaa, että polynomin P kertoimet riippuvat lineearisesti luvuista f_i. Vaikka Lagrangen kaava on teoreettisesti tärkeä, emme voi yleensä käyttää sitä varsinaiseen laskemiseen, varsinkin jos datapisteitä on paljon. Joka kerta kun vaihdamme datapistettä x_i, joudumme laskemaan uudelleen kaikki Lagrangen polynomit. Lagrangen kaava on kuitenkin hyödyllinen tilanteessa, jossa ratkaisemme interpolaatio-ongelman samoilla datapisteillä x_i, mutta eri luvuilla f_i $(i = 0, \ldots, n)$.

Esitämme seuraavaksi esimerkin Lagrangen interpolaatiokaavan käytöstä.

Esimerkki 2.1. Olkoon $n = 3$. Olkoot (x_i, f_i) pareja siten, että

x_i	0	1	2	3
f_i	1	0	3	4

,

kun $i = 0, 1, 2, 3$. Etsimme polynomin $P(z) \in \Pi_3$ arvoa muuttujan z arvolla 5, kun $P(x_i) = f_i$ kaikilla $i = 0, 1, 2, 3$. Saamme Lagrangen polynomeiksi

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)} = \frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{(0-1)(0-2)(0-3)},$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} = \frac{(x-0)(x-2)(x-3)}{(1-0)(1-2)(1-3)},$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} = \frac{(x-0)(x-1)(x-3)}{(2-0)(2-1)(2-3)},$$

$$L_3(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} = \frac{(x-0)(x-1)(x-2)}{(3-0)(3-1)(3-2)}.$$

Saamme

$$\begin{aligned} P(5) &= 1 \cdot L_0(5) + 0 \cdot L_1(5) + 3 \cdot L_2(5) + 4 \cdot L_3(5) \\ &= 1 \cdot \frac{24}{-6} + 0 \cdot \frac{30}{2} + 3 \cdot \frac{40}{-2} + 4 \cdot \frac{60}{6} \\ &= 1 \cdot (-4) + 0 + 3 \cdot (-20) + 4 \cdot 10 \\ &= -24. \end{aligned}$$

Esitämme seuraavaksi Hermiten interpolaatiokaavan, jonka avulla voimme myös ratkaista interpolaatio-ongelmia.

Lause 2.2 (Hermiten interpolaatiokaava)**.** *Mielivaltaisia reaalilukuja*

$$\xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_m$$

ja $y_i^{(k)}$*, missä* $k = 0, 1, \ldots, n_i - 1$ *ja* $i = 0, 1, \ldots, m$*, kohti on olemassa täsmälleen yksi polynomi*

$$P \in \Pi_n, \quad \textit{missä} \;\; n := \sum_{i=0}^{m} n_i - 1,$$

joka toteuttaa ehdon

$$(2.5) \qquad P^{(k)}(\xi_i) = y_i^{(k)}, \quad \textit{missä } k = 0, 1, \ldots, n_i - 1 \textit{ ja } i = 0, 1, \ldots, m.$$

Todistus. Osoitamme ensin yksikäsitteisyyden. Tarkastelemme polynomeja $P_1, P_2 \in \Pi_n$, joille $Q(x) := P_1(x) - P_2(x)$. Valitsemme polynomit siten, että ehto (2.5) on voimassa polynomeille P_1 ja P_2. Koska

$$Q^{(k)}(\xi_i) = 0, \quad \text{missä } k = 0, 1, \ldots, n_i - 1 \text{ ja } i = 0, 1, \ldots, m,$$

niin ξ_i on polynomin Q ainakin n_i-kertainen juuri. Polynomilla Q on yhteensä ainakin

$$\sum_{i=0}^{m} n_i = n + 1$$

juurta, joista jokainen on laskettu esiintymiskertojensa mukaan. Täten Q:n on oltava nolla, sillä sen aste on pienempi kuin $n + 1$.

Olemassaolo seuraa yksikäsitteisyydestä. Kaavan (2.5) yhtälöt muodostavat yhtälöryhmän, jossa on $n + 1$ lineaarista yhtälöä ja $n + 1$ kappaletta polynomin

$$P(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_n x_n$$

tuntemattomia kertoimia c_j. Tätä yhtälöryhmää vastaava matriisi on kääntyvä, koska sillä on yksikäsitteiset ratkaisut. Täten tällöin lineaarisella yhtälöryhmällä (2.5) on yksikäsitteiset ratkaisut mielivaltaisille oikean puolen arvoille $y_i^{(k)}$. □

Esitämme lopuksi lauseen, jota tarvitsemme myöhemmin luvussa 4.

Lause 2.3. *Olkoon reaalifunktio f $n+1$ kertaa differentioituva välillä $[a, b]$. Tarkastelemme pisteitä $\xi_i \in [a, b]$, joille*

$$\xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_m$$

ja joita on $m+1$ kappaletta. Jos polynomi P on korkeintaan astetta n, toisin sanoen

$$\sum_{i=0}^{m} n_i = n + 1,$$

ja P toteuttaa interpolaation ehdot

$$P^{(k)}(\xi_i) = f^{(k)}(\xi_i), \quad \text{missä } k = 0, 1, \ldots, n_i - 1 \text{ ja } i = 0, 1, \ldots, m,$$

niin tällöin jokaista lukua $\bar{x} \in [a, b]$ kohti on olemassa $\bar{\xi} \in I[\xi_0, \ldots, \xi_m, \bar{x}]$ siten, että

$$f(\bar{x}) - P(\bar{x}) = \frac{\omega(\bar{x}) f^{(n+1)}(\bar{\xi})}{(n+1)!},$$

missä $\omega(x) := (x - \xi_0)^{n_0}(x - \xi_1)^{n_1} \cdots (x - \xi_m)^{n_m}$.

Todistus (vrt. [3, s. 311]). Sivuutamme todistuksen. □

3 Newton-Cotesin integrointimenetelmistä

Tässä luvussa tarkastelemme Newton-Cotesin integrointimenetelmiä. Ensiksi esitämme Newton-Cotesin kaavat koko integrointivälille, ja sitten sovellamme kaavoja integrointivälin osaväleille, jolloin saamme yhdistettyjä sääntöjä. (Ks. [6, s. 119–122]).

3.1 Newton-Cotesin kaavoista

Saamme Newton-Cotesin integrointikaavat, kun korvaamme integrandin sopivalla polynomilla $P(x)$. Tällöin integraali

$$\int_a^b P(x)\,dx$$

on approksimoitu arvo integraalille

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

Tarkastelemme suljetun välin $[a, b]$ tasavälistä jakoa, jonka jakopisteet voimme kirjoittaa muodossa

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

missä jakovälin pituus h on

$$h := \frac{(b-a)}{n}, \quad \text{missä } n \in \mathbb{Z}_+.$$

Olkoon $P_n(x)$ interpolaatiopolynomi, jolle $\deg(P_n) \leq n$ ja jolle pätee

$$P_n(x_i) = f_i := f(x_i), \quad \text{missä } i = 0, 1, \dots, n.$$

Lagrangen interpolaatiokaavan nojalla saamme, että

$$P_n(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} f_i L_i(x), \quad \text{missä } L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}.$$

Kun esittelemme uuden muuttujan t siten, että $x = a + ht$, voimme kirjoittaa jälkimmäisen lausekkeen uudelleen muodossa

$$L_i(x) = \varphi_i(t) := \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{t-k}{i-k}.$$

Integroimalla saamme

$$\begin{aligned}\int_a^b P_n(x)\,dx &= \sum_{i=0}^n f_i \int_a^b L_i(x)\,dx \\ &= h\sum_{i=0}^n f_i \int_0^n \varphi_i(t)\,dt \\ &= h\sum_{i=0}^n f_i\alpha_i,\end{aligned}$$

missä

$$\alpha_i := \int_0^n \varphi_i(t)\,dt.$$

Kertoimet tai painot α_i riippuvat ainoastaan n:stä. Erityisesti huomaamme, että painot eivät riipu integroitavasta funktiosta f tai integrointivälin päätepisteistä a ja b.

Seuraavaksi esitämme kaksi esimerkkiä, jotka havainnollistavat approksimointia.

Esimerkki 3.1. Olkoon $n = 2$. Tällöin

$$\begin{aligned}\alpha_0 &= \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}\cdot\frac{t-2}{0-2}\,dt = \frac{1}{2}\int_0^2 (t^2-3t+2t)\,dt = \frac{1}{2}\left(\frac{8}{3}-\frac{12}{2}+4\right) = \frac{1}{3}, \\ \alpha_1 &= \int_0^2 \frac{t-0}{1-0}\cdot\frac{t-2}{1-2}\,dt = -\int_0^2 (t^2-2t)\,dt = -\left(\frac{8}{3}-4\right) = \frac{4}{3}, \\ \alpha_2 &= \int_0^2 \frac{t-0}{2-0}\cdot\frac{t-1}{2-1}\,dt = \frac{1}{2}\int_0^2 (t^2-t)\,dt = \frac{1}{2}\left(\frac{8}{3}-\frac{4}{2}\right) = \frac{1}{3}.\end{aligned}$$

Saamme seuraavan approksimaation

$$\int_a^b P_2(x)\,dx = \frac{h}{3}(f_0+4f_1+f_2)$$

integraalille

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

Approksimaatiossa f_0 ja f_2 ovat funktion f arvot integrointivälin päätepisteissä ja f_1 on funktion arvo välin keskipisteessä. Tämä on *Simpsonin sääntö*. Simpsonin säännössä interpoloimme funktiota 2. asteen polynomilla tasavälisellä jakovälillä eli sovitamme datapisteisiin paraabelin.

Esimerkki 3.2. Olkoon $n = 3$. Tällöin saamme painoiksi

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= \int_0^3 \frac{t-1}{0-1} \cdot \frac{t-2}{0-2} \cdot \frac{t-3}{0-3}\, dt = \frac{1}{6}\int_0^3 (-t^3 + 6t^2 - 11t + 6)\, dt \\
&= \frac{1}{6}\Big(-\frac{81}{4} + 54 - \frac{99}{2} + 18\Big) = \frac{3}{8}, \\
\alpha_1 &= \int_0^3 \frac{t-0}{1-0} \cdot \frac{t-2}{1-2} \cdot \frac{t-3}{1-3}\, dt = \frac{1}{2}\int_0^3 (t^3 - 5t^2 + 6t)\, dt \\
&= \frac{1}{2}\Big(\frac{81}{4} - \frac{135}{3} + 27\Big) = \frac{9}{8}, \\
\alpha_2 &= \int_0^3 \frac{t-0}{2-0} \cdot \frac{t-1}{2-1} \cdot \frac{t-3}{2-3}\, dt = \frac{1}{2}\int_0^3 (-t^3 + 4t^2 - 3t)\, dt \\
&= \frac{1}{2}\Big(-\frac{81}{4} + \frac{108}{3} - \frac{27}{2}\Big) = \frac{9}{8}, \\
\alpha_3 &= \int_0^3 \frac{t-0}{3-0} \cdot \frac{t-1}{3-1} \cdot \frac{t-2}{3-1}\, dt = \frac{1}{6}\int_0^3 (t^3 - 3t^2 + 2t)\, dt \\
&= \frac{1}{6}\Big(\frac{81}{4} - 27 + 9\Big) = \frac{3}{8}.
\end{aligned}$$

Saamme seuraavan approksimaation

$$\int_a^b P_3(x)\, dx = \frac{3h}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

integraalille

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

Tämä on *3/8-sääntö*. Approksimaatiossa f_0 ja f_3 ovat funktion f arvot integrointivälin päätepisteissä sekä f_1 ja f_2 ovat funktion arvoja päätepisteiden välissä.

Voimme johtaa muita Newton-Cotesin kaavoja vastaavalla tavalla kuin esimerkeissä 3.1 ja 3.2. *Newton-Cotesin kaavoilla*

$$\int_a^b P_n(x)\, dx = h\sum_{i=0}^{n} f_i\alpha_i, \tag{3.1}$$

missä $f_i = f(a + ih)$ ja $h = \frac{b-a}{n}$, missä $n \in \mathbb{Z}_+$, saamme approksimaation integraalille

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

Painoja α_i, missä $i = 0, 1, \ldots, n$, on taulukoitu. Ne ovat rationaalilukuja, joilla on ominaisuus

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i = n. \tag{3.2}$$

Saamme johdettua tämän ominaisuuden seuraavalla tavalla. Asetamme, että $f(x) :\equiv 1$. Tällöin soveltamalla funktion arvoa kaavaan (3.1) saamme, että polynomi $P_n(x) :\equiv 1$, sillä Newton-Cotesin kaava on integraalin $f(x)$ tarkka approksimaatio. Tällöin saamme ominaisuuden (3.2).

Jos s on painojen α_i yhteinen jakaja, niin tällöin luvut

$$\sigma_i =: s\alpha_i, \quad \text{missä } i = 0, 1, \ldots, n,$$

ovat kokonaislukuja. Saamme kaavan (3.1) muotoon

$$\int_a^b P_n(x)\, dx = h \sum_{i=0}^{n} f_i \alpha_i = \frac{b-a}{ns} \sum_{i=0}^{n} \sigma_i f_i. \tag{3.3}$$

Approksimoinneissa syntyy aina virheitä, koska arvioimme alkuperäistä integraalia. Voimme osoittaa, että saamme approksimointivirheen seuraavaan muotoon (ks. [5, s. 167])

$$\int_a^b P_n(x)\, dx - \int_a^b f(x)\, dx = h^{p+1} \cdot K \cdot f^{(p)}(\xi), \quad \text{missä } \xi \in (a, b), \tag{3.4}$$

missä $h = \frac{b-a}{n}$ on jakovälin pituus, K on reaalilukuvakio, p on derivaatan kertaluku ja $f^{(p)}$ on funktion f p:s derivaatta. Edellä (a, b) tarkoittaa avointa väliä a:sta b:hen. Lukujen p ja K arvot riippuvat vain luvusta n, mutta eivät integrandista f. Esimerkiksi *puolisuunnikassäännön* (ks. taulukko 1) approksimointivirhe on

$$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi),$$

kun $p = 2$ ja $K = \frac{1}{12}$ kaavassa (3.4). Myös virheitä on taulukoitu.

Seuraavaan taulukkoon olemme koonneet Newton-Cotesin kaavoja, kun $n = 1, 2, \ldots, 6$. Suuremmilla n:n arvoilla joistakin luvun σ_i arvoista tulee negatiivisia. Näitä arvoja vastaavat kaavat ovat sopimattomia numeerisiin tarkoituksiin, sillä termejä kumoutuu laskiessamme summaa (3.3) ja tällöin laskuihin syntyy virheitä.

Taulukko 1: Newton-Cotesin sääntöjä.

n	σ_i							ns	Virhe	Nimi
1	1	1						2	$h^3 \frac{1}{12} f^{(2)}(\xi)$	Puolisuunnikassääntö
2	1	4	1					6	$h^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi)$	Simpsonin sääntö
3	1	3	3	1				8	$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi)$	3/8-sääntö
4	7	32	12	32	7			90	$h^7 \frac{8}{945} f^{(6)}(\xi)$	Milnen sääntö
5	19	75	50	50	75	19		288	$h^7 \frac{275}{12096} f^{(6)}(\xi)$	–
6	41	216	27	272	27	216	41	840	$h^9 \frac{9}{1400} f^{(8)}(\xi)$	Weddlen sääntö

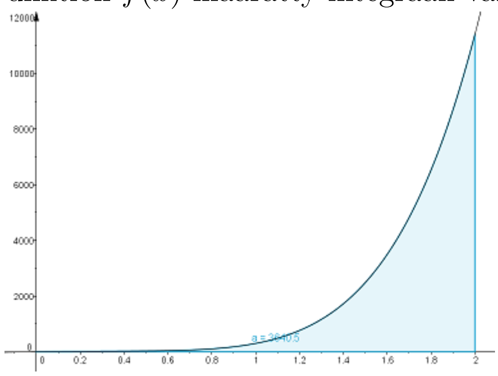
Esitämme seuraavaksi esimerkin 3/8-säännöstä.

Esimerkki 3.3. Etsimme funktion

$$f(x) = 500x^5 - 400x^4 + 300x^3 - 200x^2 + 100x + 0,25$$

integraalin approksimaatiota 3/8-säännöllä integrointivälillä nollasta kahteen. Tiedämme, että $f(0) = 0,25$ ja $f(2) = 11\,400,25$ ja integraalin tarkka arvo on $3640,5$.

Kuva 1: Funktion $f(x)$ määrätty integraali välillä $[0, 2]$.



Nyt

$$h = \frac{b-a}{3} = \frac{2-0}{3} = \frac{2}{3}.$$

Luvun h avulla saamme tasavälisen jaon ja sitä vastaavat funktion arvot, jolloin

$$f(0) = 0,25; f(\frac{2}{3}) = \frac{52\,243}{972}, f(\frac{4}{3}) = \frac{1\,294\,643}{972}, f(2) = 11\,400,25.$$

Pisteet x_0, x_1, x_2 ja x_3 ovat tasavälisen jaon pisteet, joiden arvot olemme laskeneet edellä. Nyt

$$\begin{aligned}\int_0^2 f(x) &\approx \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \\ &= \frac{2}{8}[0,25 + 3 \cdot \frac{52\,243}{972} + 3 \cdot \frac{1\,294\,643}{972} + 11\,400,25] \\ &= 3889,3889.\end{aligned}$$

Integraalin tarkka arvo ja approksimaatio eroavat toisistaan

$$\frac{3889,3889 - 3640,5}{3640,5} \cdot 100\,\% = 6,8\,\%.$$

Virheen ylärajassa luku ξ on tuntematon, mutta voimme arvioida, että lauseke $|f^{(4)}(\xi)|$ on suurimmillaan silloin, kun funktion $f(x)$ neljäs derivaatta $f^{(4)}(x) = 60\,000x - 9600$ saa suurimman arvonsa välillä $[0, 2]$. Tällöin saamme lausekkeen $f^{(4)}(x)$ arvoksi $110\,400$. Nyt saamme virheeen ylärajaksi

$$h^5 \frac{3}{80} f^{(4)}(\xi) = \frac{32}{243} \cdot \frac{3}{80} \cdot 110\,400 = \frac{96}{19440} \cdot 110\,400 = 545,1851;$$

kun $h = \frac{2}{3}$ on jakovälin pituus.

Saamme lisää integrointikaavoja integrandin f Hermiten interpolaatiolla (ks. luku 2 lause 2.2) käyttämällä polynomia $P \in \Pi_n$, jonka aste on pienempi tai yhtä suuri kuin n. Yksinkertaisimmassa tapauksessa korvaamme integrandin f polynomilla $P \in \Pi_3$, jolle

$$P(a) = f(a),\ P'(a) = f'(a),$$
$$P(b) = f(b),\ P'(b) = f'(b).$$

Kun käytämme yleistettyä Lagrangen kaavaa (ks. [6, s. 53]) tapauksessa $a = 0$ ja $b = 1$, polynomille P pätee

$$\begin{aligned}P(t) =& f(0)[(t-1)^2 + 2t(t-1)^2] + f(1)[t^2 - 2t^2(t-1)] \\ &+ f'(0)t(t-1)^2 + f'(1)t^2(t-1).\end{aligned}$$

Kun integroimme tämän polynomin, saamme

$$\int_0^1 P(t)\,dt = \frac{1}{2}\left(f(0) + f(1)\right) + \frac{1}{12}\left(f'(0) - f'(1)\right).$$

Saamme yllä olevasta kaavasta integrointisäännön yksinkertaisella muuttujan vaihdoksella yleisessä tapauksessa, kun $a < b$ $(h := b - a)$, jolloin

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx M(h) := \frac{h}{2}(f(a) + f(b)) + \frac{h^2}{12}(f'(a) - f'(b)). \tag{3.5}$$

Jos $f \in C^4[a,b]$, voimme kirjoittaa säännön (3.5) approksimointivirheen seuraavassa muodossa (ks. [6, s. 120])

$$M(h) - \int_a^b f(x)\,dx = -\frac{h^5}{720} f^{(4)}(\xi), \quad \text{missä } \xi \in (a,b) \text{ ja } h = (b-a). \tag{3.6}$$

Jos luvut x_i, missä $i = 0, 1, \ldots, n$, $x_0 = a$ ja $x_n = b$, eivät ole jakautuneet tasaisesti välille h, saamme integrandin $f(x)$ interpoloinnilla eri integrointisääntöjä. Tällä tavalla saamme myös Gaussin integrointisääntöjä, joita käsittelemme myöhemmin luvussa 4.

3.2 Yhdistetyistä säännöistä

Emme yleensä sovella Newton-Cotesin kaavoja tai muita vastaavia kaavoja koko integrointivälille $[a,b]$, vaan käytämme niitä yksitellen osaväleillä, joihin kyseinen integrointiväli on jaettu. Arvioimme koko integraalia osavälien approksimaatioiden summalla. Sanomme, että paikallisesti käytetty integrointisääntö on laajennettu, mistä saamme *yhdistetyn säännön*. Jatkamme tarkastelemalla joitakin tällaisia yhdistettyjä sääntöjä tässä aliluvussa.

Kun $n = 1$, saamme puolisuunnikassäännöstä (ks. taulukko 1) approksimoidun arvon

$$I_i := \frac{h}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

osavälillä $[x_i, x_{i+1}]$ ja osituksella $x_i = a + ih$, missä $i = 0, 1, \ldots, N$ ja missä $h := (b-a)/N$. Saamme koko integrointivälille approksimaation

$$T(h) := \sum_{i=0}^{N-1} I_i = h[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}],$$

mikä on *puolisuunnikassumma* jakovälin pituudelle h. Jokaisella osavälillä $[x_i, x_{i+1}]$ saamme virheeksi

$$I_i - \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx = \frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi_i), \quad \text{missä } \xi_i \in (x_i, x_{i+1}),$$

kun oletamme, että $f \in C^2[a,b]$. Kun laskemme kaikkien osavälien virheet yhteen, saamme

$$T(h) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{h^3}{12} \sum_{i=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_i) = \frac{h^2}{12}(b-a)\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_i).$$

Koska

$$\min_i f^{(2)}(\xi_i) \leq \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_i) \leq \max_i f^{(2)}(\xi_i)$$

ja funktio $f^{(2)}(x)$ on jatkuva, niin on olemassa $\xi \in [\min_i \xi_i, \max_i \xi_i] \subset (a, b)$ ja

$$f^{(2)}(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f^{(2)}(\xi_i),$$

kun $[\min_i \xi_i, \max_i \xi_i]$ on väli ξ_i:n pienimmästä arvosta suurimpaan arvoon. Nyt saamme virheeksi

$$T(h) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{12} h^2 f^{(2)}(\xi), \quad \text{missä } \xi \in (a, b).$$

Kun pienennämme jakovälin pituutta h (ja kasvatamme samalla lukua N), approksimaatiovirhe lähestyy nollaa nopeudella h^2, joten menetelmä on toista kertalukua.

Jos N on parillinen, voimme soveltaa Simpsonin sääntöä yksitellen jokaisella osavälillä $[x_{2i}, x_{2i+1}, x_{2i+2}]$, missä $i = 0, 1, \ldots, N/2 - 1$, jolloin saamme approksimaation

$$\frac{h}{3}(f(x_{2i}) + 4f(x_{2i+1}) + f(x_{2i+2})).$$

Kun laskemme yhteen $N/2$ approksimaatiota, saamme Simpsonin säännön yhdistetyn säännön

$$\begin{aligned} S(h) = \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + \cdots \\ +2f(b-2h) + 4f(b-h) + f(b)] \end{aligned}$$

koko integrointivälille. Saamme yhdistetyn säännön $S(h)$ virheen, kun laskemme kaikki yksittäiset $N/2$ virhettä yhteen, jolloin

$$S(h) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{h^5}{90} \sum_{i=0}^{(N/2)-1} f^{(4)}(\xi_i) = \frac{h^4}{90} \frac{b-a}{2} \frac{2}{N} \sum_{i=0}^{(N/2)-1} f^{(4)}(\xi_i).$$

Voimme saada vastaavilla perusteluilla kuin puolisuunnikassummalla virheeksi

$$S(h) - \int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \text{missä } \xi \in (a, b),$$

kun $f \in C^4[a, b]$. Tällöin menetelmä on neljättä kertalukua, sillä approksimaatiovirhe lähestyy nollaa nopeudella h^4.

Kun laajennamme yhtälön (3.5) integrointisääntöä $M(h)$, huomaamme merkittävän vaikutuksen. Kun laskemme yhteen jokaisen osaintegraalin arvot

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx, \quad \text{missä } i = 0, 1, \ldots, N-1,$$

kaikki ”sisäpuoliset” derivaatat $f'(x_i)$, missä $0 < i < N$, kumoutuvat. Saamme nyt seuraavan approksimaation koko integraalille. Tällöin

$$\begin{aligned} U(h) :=& h\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right] + \frac{h^2}{12}[f'(a) - f'(b)] \\ =& T(h) + \frac{h^2}{12}[f'(a) - f'(b)]. \end{aligned}$$

Voimme ajatella tätä kaavaa puolisuunnikassumman $T(h)$ korjauksena. Voimme laajentaa integrointisäännön $M(h)$ virheen (3.6) yhdistetyn säännön $U(h)$ virhekaavaksi vastaavalla tavalla kuin aiemmin. Täten

$$U(h) - \int_a^b f(x)\,dx = -\frac{b-a}{720}h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \text{missä } \xi \in (a,b), \tag{3.7}$$

kun $f \in C^4[a,b]$. Kun vertaamme tätä virhettä puolisuunnikassumman virheeseen, huomaamme, että menetelmän kertaluku on parantunut kahdella. Saimme parannuksen aikaan hyvin pienellä lisätyöllä - derivaattojen $f'(a)$ ja $f'(b)$ laskemisella. Jos nämä kaksi rajaderivaattaa ovat samoja (esimerkiksi jaksoittaisilla funktioilla), puolisuunnikassumma itsessään tarjoaa menetelmän, jonka kertaluku on vähintään 4.

4 Gaussin integrointimenetelmistä

Tässä luvussa tarkastelemme integraaleja, jotka ovat muotoa

$$I(f) := \int_a^b \omega(x) f(x)\, dx.$$

Tässä integrandissa funktio $\omega(x)$ on annettu ei-negatiivinen painofunktio välillä $[a, b]$. Painofunktioiden määrittelyn jälkeen käymme läpi keskeisiä tuloksia ortogonaalisista polynomeista. Näiden tulosten avulla voimme myöhemmin muotoilla Gaussin integrointisääntöjä. (Ks. [6, s. 142–151] ja [2, s. 21–22, s. 29]).

4.1 Painofunktioista

Määrittelemmme ensin painofunktion $\omega(x)$ välillä $[a, b]$.

Määritelmä 4.1. Olkoon $\omega(x)$ annettu ei-negatiivinen funktio välillä $[a, b]$. Sanomme funktion $\omega(x)$ olevan *painofunktio*, jos se toteuttaa seuraavan ehdon. Jos funktio $\omega(x) \geq 0$ kaikilla $x \in [a, b]$ ja

$$\int_a^b \omega(x)\, dx > 0,$$

niin tällöin painofunktio $\omega(x)$ on määritelty välillä $[a, b]$.

Esitämme seuraavaksi esimerkin painofunktiosta.

Esimerkki 4.1. Jos funktio $\omega(x)$ on positiivinen ja jatkuva äärellisellä suljetulla välillä $[a, b]$, niin määritelmän 4.1 ehdo toteutuu. Tällöin funktio $\omega(x)$ on painofunktio.

Oletamme jatkossa, että integrandi $\omega(x)f(x)$ on Riemann-integroituva ja painofunktio $\omega(x)$ on jatkuva.

Huomautus 4.1. Olkoot $s(x)$ ei-negatiivisia polynomeja välillä $[a, b]$. Jos integraali

$$\int_a^b \omega(x)s(x)\, dx = 0,$$

niin tällöin kaikille polynomeille $s(x)$ pätee $s(x) \equiv 0$. Tämä on ekvivalenttia sen kanssa, että

$$\int_a^b \omega(x)\, dx > 0.$$

(Ks. [6, s. 156]).

Siirrymme seuraavaksi tutkimaan integraalin approksimaatioita ja summalausekkeita, jotka ovat muotoa

$$\tilde{I}(f) := \sum_{i=1}^{n} \omega_i f(x_i), \tag{4.1}$$

missä $\tilde{I}$ tarkoittaa integraalin I likiarvoa.

Newton-Cotesin kaavat (ks. luku 3) ovat myös tätä muotoa, mutta tällöin vaadimme lukujen x_i muodostavan tasavälisen jaon välillä $[a, b]$. Tässä luvussa lievennämme kyseistä rajoitusta. Yritämme valita luvut x_i ja painot ω_i siten, että saamme mahdollisimman suuren kertaluvun integrointimenetelmälle. Tässä kertaluku perustuu integrointitarkkuuteen. Yritämme siis saada mahdollisimman suuren asteen, johon asti polynomit integroituvat tarkasti kaavan 4.1 avulla. Huomaamme, että tämä on mahdollista ja että se johtaa luokkaan hyvinmääriteltyjä Gaussin integrointisääntöjä tai Gaussin kvadratuuristen kaavojen luokkaan.

Tarvitsemme ensin joitakin perustuloksia ortogonaalisista polynomeista ennen, kuin voimme määrittää Gaussin integrointisääntöjen pisteet ja painot.

4.2 Perustuloksia ortogonaalisista polynomeista

Määrittelemme aluksi, mitä tarkoitamme funktioiden ortogonaalisuudella.

Määritelmä 4.2. Olkoon $V = C[a, b]$. Olkoon painofunktio $\omega(x) \geq 0$ Riemann-integroituva välillä $[a, b]$ siten, että

$$\int_a^b \omega(x)\,dx > 0.$$

Sanomme, että funktioiden $f, g \in V$ *skalaaritulo* on

$$(f, g) := \int_a^b \omega(x) f(x) g(x)\,dx.$$

Sanomme, että funktiot f ja g ovat *ortogonaalisia*, mikäli niiden skalaaritulolle pätee $(f, g) = 0$.

Olkoon edelleen $V = C[a, b]$. Jos $f_0, f_1, \ldots$ on V:n äärellinen tai ääretön osajoukko siten, että

$$(f_i, f_j) = 0, \quad \text{missä } i \neq j,$$

niin osajoukko on ortogonaalinen. Jos lisäksi

$$(f_i, f_i) = 1, \quad \text{missä } i = 0, 1, \ldots,$$

niin osajoukko on *ortonormaali*.

Huomautus 4.2. Merkintä xp_i tarkoittaa polynomia, joka saa arvon $xp_i(x)$ kaikilla x.

Seuraava lause osoittaa pareittain ortogonaalisten polynomien, jotka liittyvät painofunktioon $\omega(x)$, jonon olemassaolon.

Lause 4.1. *On olemassa polynomit $p_j \in \bar{\Pi}_j$, missä $j = 0, 1, 2, \ldots$, siten, että $(p_i, p_k) = 0$ kaikilla $i \neq k$. Ne voidaan määritellä yksikäsitteisesti rekursiolla*

$$p_0(x) \equiv 1, \tag{4.2}$$

$$p_{i+1}(x) \equiv (x - \delta_{i+1})p_i(x) - \gamma_{i+1}^2 p_{i-1}(x), \; \textit{jos } i \geq 0, \tag{4.3}$$

$$\textit{missä } p_{-1}(x) \equiv 0,$$

ja

$$\delta_{i+1} := \frac{(xp_i, p_i)}{(p_i, p_i)}, \; \textit{jos } i \geq 0, \tag{4.4}$$

$$\gamma_{i+1}^2 := \begin{cases} 0, & \textit{kun } i = 0, \\ \frac{(p_i, p_i)}{(p_{i-1}, p_{i-1})}, & \textit{kun } i \geq 1. \end{cases} \tag{4.5}$$

Todistus. Todistamme lauseen 4.1 induktiolla. Voimme konstruoida polynomeja rekursiivisesti *Gram-Schmidt ortogonalisaatio* -tekniikalla. Näemme selvästi, että polynomi $p_0(x) \equiv 1$, sillä $\bar{\Pi}_0 = \{p \mid p(x) = x^0 = 1\}$.

Oletamme sitten induktio-oletuksena, että kaikki ortogonaaliset polynomit, joilla on lauseessa 4.1 mainitut ominaisuudet, on konstruoitu jokaiselle $j \leq i$. Oletamme lisäksi, että nämä polynomit on osoitettu yksikäsitteisiksi. Osoitamme seuraavaksi, että on olemassa yksikäsitteinen polynomi $p_{i+1} \in \bar{\Pi}_{i+1}$, jonka skalaaritulo

$$(p_{i+1}, p_j) = 0 \quad \text{kaikilla } j \leq i \tag{4.6}$$

ja joka toteutaa lauseen 4.1 ehdon (4.3).

Jokainen polynomi $p_{i+1} \in \bar{\Pi}_{i+1}$ voidaan kirjoittaa yksikäsitteisesti muodossa

$$p_{i+1}(x) \equiv (x - \delta_{i+1})p_i(x) + c_{i-1}p_{i-1}(x) + c_{i-2}p_{i-2}(x) + \ldots + c_0 p_0(x),$$

koska suurimman termin ja polynomien p_j, missä $j \leq i$, suurimpien termien kertoimien arvot ovat 1. Koska $(p_j, p_k) = 0$ kaikilla j, joille $k \leq i$ ja $j \neq k$, kaava (4.6) on voimassa, jos ja vain jos

$$(p_{i+1}, p_i) = (xp_i, p_i) - \delta_{i+1}(p_i, p_i) = 0, \tag{4.7}$$

$$(4.8) \qquad (p_{i+1}, p_{j-1}) = (xp_{j-1}, p_i) + c_{j-1}(p_{j-1}, p_{j-1}) = 0 \text{ kaikilla } j \leq i.$$

Huomautuksen 4.1 ehto, missä on vastaavasti käytetty polynomeja p_i^2 ja p_{j-1}^2 ei-negatiivisena polynomina s, estää sen, että skalaarituloille pätisi

$$(p_i, p_i) = 0,$$
$$(p_{j-1}, p_{j-1}) = 0,$$

kun $1 \leq j \leq i$. Täten voimme ratkaista yhtälöt (4.7) ja (4.8) yksikäsitteisesti. Yhtälöstä (4.7) saamme yhtälön (4.4). Induktio-oletuksesta seuraa, että

$$p_j(x) \equiv (x - \delta_j)p_{j-1}(x) - \gamma_j^2 p_{j-2}(x) \text{ kaikilla } j \leq i.$$

Kun ratkaisemme tästä polynomin $xp_{j-1}(x)$, ratkaisun avulla voimme osoittaa, että $(xp_{j-1}, p_i) = (p_j, p_i)$ jokaisella $j \leq i$. Täten saamme ratkaisemalla yhtälön (4.8), että

$$c_{j-1} = -\frac{(p_j, p_i)}{(p_{j-1}, p_{j-1})} = \begin{cases} -\gamma_{i+1}^2, & \text{kun } j = i, \\ 0, & \text{kun } j < i. \end{cases}$$

Täten lauseen kohta (4.3) pätee arvolla $i + 1$. □

Huomautus 4.3. Jatkossa polynomi p_n tarkoittaa lauseessa 4.1 esiintyvää polynomia.

Voimme esittää jokaisen polynomin $p \in \Pi_k$ ortogonaalisten polynomien p_i, kun $i \leq k$, lineaarikombinaationa. Saamme seuraavan seurauksen.

Seuraus 4.1. *Skalaaritulo* $(p, p_n) = 0$ *kaikilla polynomeilla* $p \in \Pi_{n-1}$.

Lause 4.2. *Polynomin* p_n *juuret* x_i*, missä* $i = 1, \ldots, n$*, ovat reaalisia ja yksinkertaisia. Kaikki polynomin* p_n *juuret* x_i *kuuluvat avoimelle välille* (a, b).

Todistus. Tarkastelemme polynomin p_n juuria, jotka kuuluvat avoimelle välille (a, b) ja jotka ovat paritonta kertalukua. Toisin sanoen juuret ovat kohdissa, joissa polynomi p_n vaihtaa merkkiä eli

$$a < x_1 < \cdots < x_l < b.$$

Polynomi

$$q(x) := \prod_{j=1}^{l} (x - x_j) \in \bar{\Pi}_l$$

on sellainen, että polynomi $p_n(x)q(x)$ ei muuta merkkiänsä suljetulla välillä $[a, b]$, joten huomautuksen 4.1 nojalla

$$(p_n, q) = \int_a^b \omega(x)p_n(x)q(x)dx \neq 0.$$

Täten polynomin q asteelle on voimassa, että $\deg(q) = l = n$, sillä muuten pätisi $(p_n, q) = 0$ seurauksen 4.1 nojalla. □

Lause 4.3. *Jos A on $n \times n$ matriisi, missä*

$$A := \begin{bmatrix} p_0(t_1) & \dots & p_0(t_n) \\ \vdots & & \vdots \\ p_{n-1}(t_1) & \dots & p_{n-1}(t_n) \end{bmatrix},$$

niin matriisi A on kääntyvä kaikilla keskenään erillisillä argumenteilla t_i, missä $i = 1, \dots, n$.

Todistus. Teemme vastaoletuksen, ettei matriisi A ole kääntyvä. Tällöin on olemassa sellainen rivivektori c, että $c^T = (c_0, \dots, c_{n-1}) \neq 0$, ja rivivektorin ja matriisin tulolle on voimassa $c^T A = 0$. Siis polynomilla

$$q(x) :\equiv \sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i(x),$$

jolle $\deg(p) < n$, on n erillistä juurta $t_1, \dots, t_n$ ja polynomin täytyy olla identtisesti nolla. Olkoon l suurin indeksi, jolla $c_l \neq 0$. Tällöin pätee

$$p_l(x) = -\frac{1}{c_l} \sum_{i=0}^{l-1} c_i p_i(x).$$

Tämä on ristiriita, sillä oikeanpuoleisen polynomin aste on pienempi kuin polynomin $p_l \in \Pi_l$ aste. □

Edellinen lause osoittaa, että interpolaatio-ongelma, joka koskee muotoa

$$p(x) \equiv \sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i(x), \tag{4.9}$$

missä $p(t_i) = f_i$ $(i = 1, \dots, n)$, olevan funktion löytämistä, on aina yksikäsitteisesti ratkaistavissa. Lauseen ehdon mukaan millä tahansa muotoa (4.9) olevalla polynomilla on korkeintaan $n-1$ nollakohtaa.

Seuraavaksi toteamme ja todistamme tämän luvun päätuloksen.

Lause 4.4.

(a) *Olkoot $x_1, x_2, \dots, x_n$ n:nnen asteen ortogonaalisen polynomin $p_n(x)$ juuret. Olkoon $w_1, w_2, \dots, w_n$ kääntyvää matriisia vastaavan yhtälöryhmän*

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i) w_i = \begin{cases} (p_0, p_0), & \text{jos } k = 0, \\ 0, & \text{jos } k = 1, 2, \dots, n-1, \end{cases} \tag{4.10}$$

ratkaisu. Tällöin $w_i > 0$ kaikilla $i = 1, 2, \dots, n$, ja kaikilla polynomeilla $p \in \Pi_{2n-1}$ pätee, että

$$\int_a^b \omega(x) p(x) dx = \sum_{i=1}^{n} w_i p(x_i). \tag{4.11}$$

Sanomme, että positiiviset luvut w_i ovat "painoja".

(b) *Kääntäen, jos luvut x_i ja w_i, missä $i = 1, \ldots, n$, ovat sellaisia, että ehto* (4.11) *pitää paikkansa kaikilla $p \in \Pi_{2n-1}$, niin luvut x_i ovat polynomin p_n juuret ja painot w_i toteuttavat ehdon* (4.10).

(c) *Ei ole mahdollista löytää sellaisia pisteitä x_i ja w_i, missä $i = 1, \ldots, n$, että ehto* (4.11) *pitäisi paikkansa kaikilla polynomeilla $p \in \Pi_{2n}$.*

Todistus. Lauseen 4.2 mukaan polynomin p_n juuret x_i, missä $i = 1, \ldots, n$, ovat reaalisia ja pareittain erillisiä lukuja välillä (a, b). Tällöin $n \times n$-matriisi

$$A = \begin{bmatrix} p_0(x_1) & \ldots & p_0(x_n) \\ \vdots & & \vdots \\ p_{n-1}(x_1) & \ldots & p_{n-1}(x_n) \end{bmatrix} \tag{4.12}$$

on kääntyvä lauseen (4.3) nojalla, sillä kaikki argumentit ovat erillisiä. Täten yhtälöryhmällä (4.10) on yksikäsitteinen ratkaisu.

Tarkastelemme satunnaista polynomia $p \in \Pi_{2n-1}$. Voimme kirjoittaa sen muodossa

$$p(x) \equiv p_n(x)q(x) + r(x), \tag{4.13}$$

missä q ja r ovat polynomeja joukosta Π_{n-1}. Voimme ilmaista polynomit q ja r ortogonaalisten polynomien lineaarisina kombinaatioina

$$q(x) \equiv \sum_{k=0}^{n-1} \alpha_k p_k(x)$$

ja

$$r(x) \equiv \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k p_k(x).$$

Koska $p_0(x) \equiv 1$, ehdosta (4.13) ja seurauksesta 4.1 seuraa, että

$$\int_a^b \omega(x)p(x)dx = (p_n, q) + (r, p_0) = \beta_0(p_0, p_0).$$

Toisaalta ehdosta (4.13) (sillä $p_n(x_i) = 0$) ja yhtälöstä (4.10) seuraa, että

$$\sum_{i=1}^{n} w_i p(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i r(x_i) = \sum_{k=0}^{n-1} \beta_k \left(\sum_{i=0}^{n} w_i p_k(x_i) \right) = \beta_0(p_0, p_0).$$

Siis

$$\int_a^b \omega(x)p(x)\,dx = \beta_0(p_0, p_0) = \sum_{i=1}^{n} w_i p(x_i).$$

Täten ehto (4.11) on täytetty.

Todistamme seuraavaksi apuväitteen ennen, kuin saatamme todistuksen loppuun.

Apuväite 4.1. *Jos luvut x_i ja w_i, missä $i = 1, \dots, n$, ovat sellaisia, että yhtälö* (4.11) *pitää paikkansa kaikilla polynomeilla $p \in \Pi_{2n-1}$, niin $w_i > 0$ kaikilla $i = 1, \dots, n$.*

Voimme todentaa tämän tuloksen soveltamalla yhtälöä (4.11) polynomeihin

$$\bar{p}_j(x) :\equiv \prod_{\substack{h=1 \\ h \neq j}}^{n} (x - x_h)^2 \in \Pi_{2n-2},$$

missä $j = 1, \dots, n$. Huomaamme, että

$$0 < \int_a^b \omega(x) \bar{p}_j(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} w_i \bar{p}_j(x_i) = w_j \prod_{\substack{h=1 \\ h \neq j}}^{n} (x_j - x_h)^2$$

huomautuksen 4.1 nojalla. Tämä täydentää lauseen 4.4 kohdan (a) todistuksen.

Saatamme nyt loppuun lauseen todistuksen. Oletamme, että luvut x_i ja w_i, missä $i = 1, \dots, n$, ovat sellaisia, että ehto (4.11) pätee kaikilla polynomeilla $p \in \Pi_{2n}$. Tällöin

$$\bar{p}(x) :\equiv \prod_{j=1}^{n} (x - x_j)^2 \in \Pi_{2n},$$

mikä aiheuttaa ristiriidan oletuksemme kanssa, sillä huomautuksen 4.1 nojalla

$$0 < \int_a^b \omega(x) \bar{p}(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} w_i \bar{p}(x_i) = 0.$$

Tämä todistaa lauseen 4.4 kohdan (c).

Todistaaksemme lauseen 4.4 kohdan (b) oletamme seuraavaksi, että luvut x_i ja w_i, missä $i = 1, \dots, n$, ovat sellaisia, että yhtälö (4.11) pitää paikkansa kaikilla $p \in \Pi_{2n-1}$. Pisteiden x_i pitää olla erilliset, sillä muuten voisimme muodostaa saman integrointisäännön käyttäen vain $n - 1$ kappaletta lukuja x_i, mikä on ristiriidassa lauseen 4.4 kohdan (c) kanssa. Soveltamalla yhtälöä (4.11) ortogonaalisiin polynomeihin $p = p_k$, missä $k = 0, \dots, n - 1$, saamme

$$\sum_{i=1}^{n} w_i p_k(x_i) = \int_a^b \omega(x) p_k(x)\, dx = (p_k, p_0) = \begin{cases} (p_0, p_0), & \text{jos } k = 0, \\ 0, & \text{jos } k = 1, \dots, n - 1. \end{cases}$$

Toisin sanoen painojen w_i täytyy toteuttaa yhtälö (4.10).

Kun sovellamme yhtälöä (4.11) polynomeihin

$$p(x) :\equiv p_k(x) p_n(x), \quad \text{missä } k = 0, \dots, n - 1,$$

saamme seurauksen 4.1 nojalla

$$0 = (p_k, p_n) = \sum_{i=1}^{n} w_i p_n(x_i) p_k(x_i), \quad \text{missä } k = 0, \ldots, n-1.$$

Toisin sanoen vektori $c := (w_1 p_n(x_1), \ldots, w_n p_n(x_n))^T$ ratkaisee homogeenisen yhtälöryhmän $Ac = 0$, missä matriisi A on muotoa (4.12). Koska pisteet x_i, missä $i = 1, \ldots, n$, ovat erilliset, matriisi A on kääntyvä lauseen (4.3) nojalla. Täten $c = 0$ ja $w_i p_n(x_i) = 0$ kaikilla $i = 1, \ldots, n$. Koska painoille pätee $w_i > 0$ apuväitteen 4.1 nojalla, saamme $p_n(x_i) = 0$, missä $i = 1, \ldots, n$. Tämä saattaa loppuun lauseen 4.4 kohdan (b) todistuksen. □

Gauss on ensimmäisenä todistanut lauseen 4.4 yleisimmällä painofunktiolla $\omega(x) \equiv 1$ ja suljetulla välillä $[-1, 1]$. Vastaavat ortogonaaliset polynomit ovat

$$p_k(x) :\equiv \frac{k!}{(2k)!} \frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^k, \quad \text{missä } k = 0, 1, \ldots . \tag{4.14}$$

Näille polynomeille on voimassa, että $p_k \in \bar{\Pi}_k$, ja osittaisintegrointi osoittaa, että skalaaritulolle pätee $(p_i, p_k) = 0$, kun $i \neq k$. Sanomme, että polynomit (4.14) ovat *Legendren polynomeja* kerrointa lukuun ottamatta. Legendren polynomit ovat Legendren differentiaaliyhtälön (ks. [2, s. 33-34])

$$(1 - x^2) y'' - 2xy' + n(n+1) y = 0, \quad \text{missä } y = P_n(x),$$

ratkaisut, kun n on luonnollinen luku. Legendren polynomit voidaan määritellä myös rekursiivisesti siten, että

$$(n+1) P_{n+1}(x) = (2n+1) x P_n(x) - n P_{n-1}(x),$$

missä $P_0(x) = 1$ ja $P_1(x) = 1$. Voimme esittää Legendren polynomit myös Rodriguesin kaavan avulla muodossa

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left[(x^2 - 1)^n \right].$$

Seuraavassa taulukossa annamme joitakin arvoja luvuille x_i ja painoille w_i tässä tärkeässä erityistapauksessa. Enemmän arvoja löytyy kirjasta National Bureau of Standard's *Handbook of Mathematical Functions* (ks. [1, s. 916]).

Taulukko 2: Painoja w_i ja lukuja x_i.

n	w_i	x_i
1	$w_1 = 2$	$x_1 = 0$
2	$w_1 = w_2 = 1$	$x_2 = -x_1 = 0,5773502692\ldots$
3	$w_1 = w_3 = \frac{5}{9}$	$x_3 = -x_1 = 0,7745966692\ldots$
	$w_2 = \frac{8}{9}$	$x_2 = 0$
4	$w_1 = w_4 = 0,3478548451\ldots$	$x_4 = -x_1 = 0,8611363116\ldots$
	$w_2 = w_3 = 0,6521451549\ldots$	$x_3 = -x_2 = 0,3399810436\ldots$
5	$w_1 = w_5 = 0,2369268851\ldots$	$x_5 = -x_1 = 0,9061798459\ldots$
	$w_2 = w_4 = 0,4786286705\ldots$	$x_4 = -x_2 = 0,5384693101\ldots$
	$w_3 = \frac{138}{335} = 0,5688888889\ldots$	$x_3 = 0$

Muita tärkeitä tapauksia, jotka johtavat Gaussin integrointisääntöihin, on myös taulukoitu (ks. [6, s. 148]).

4.3 Tridiagonaalimatriiseista

Olemme karakterisoineet luvut x_i ja painot w_i, jotka voimme sijoittaa Gaussin integrointisäännöille annetuille painofunktioille. Emme ole vielä esitelleet menetelmiä, joilla varsinaisesti laskemme Gaussin integrointisääntöjen sijoituksia. Sijoitamme Gaussin integrointisääntöihin pisteitä, jotka ovat ortogonaalisen polynomin nollakohtia. Voimme ilmaista Gaussin integrointisäännöt muodossa

$$\int_b^a \omega(x) f(x)\, dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i),$$

missä $\omega(x)$ on annettu painofunktio ja missä n on annettu luonnollinen luku (ks. [4, s. 121]). Tarkastelemme edellä mainittua ongelmaa sellaisen oletuksen pohjalta, että rekursion (4.2) ja (4.3) kertoimet δ_i ja γ_i on annettu (ks. lause 4.1).

Ortogonaalisten polynomien teoria liittyy reaalisten tridiagonaalimatriisien

$$J_n = \begin{bmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & & & \\ \gamma_2 & \cdot & \cdot & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \gamma_n \\ & & & & \gamma_n & \delta_n \end{bmatrix} \tag{4.15}$$

ja niiden pääalimatriisien

$$J_j = \begin{bmatrix} \delta_1 & \gamma_2 & & & & \\ \gamma_2 & \cdot & \cdot & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \gamma_j \\ & & & & \gamma_j & \delta_j \end{bmatrix}$$

teoriaan. Havaitsemme, että pääalimatriisin J_j karakteristiset polynomit p_j toteuttavat rekursion (4.2) ja (4.3) lauseessa 4.1, kun matriisin alkiot δ_i ja γ_i ovat kertoimina (ks. [6, s. 149]). Täten p_n on tridiagonaalimatriisin J_n karakteristinen polynomi. Saamme seurauksena seuraavan lauseen.

Lause 4.5. *Ortogonaalisen polynomin p_n juuret x_i, missä $i = 1, \ldots, n$, ovat tridiagonaalimatriisin J_n ominaisarvot.*

Esitämme seuraavaksi lauseen, joka liittää painot w_i tridiagonaalimatriiseihin J_n.

Lause 4.6. *Olkoon J_n tridiagonaalimatriisi* (4.14) *ja $v^{(i)} := (v_1^{(i)}, \ldots, v_n^{(i)})^T$ sen ominaivektori ominaisarvolla x_i siten, että $J_n v^{(i)} = x_i v^{(i)}$. Olkoon lisäksi $v^{(i)}$ skaalattu siten, että*

$$v^{(i)T} v^{(i)} = (p_0, p_0) = \int_a^b \omega(x)\, dx.$$

Tällöin painoille pätee

$$w_i = (v_1^{(i)})^2, \quad \textit{missä } i = 1, \ldots, n.$$

Todistus (ks. [6, s. 149–150]). Todistus sivuutetaan. □

Lopuksi arvioimme Gaussin integrointimenetelmän virhettä.

Lause 4.7. *Jos $f \in C^{2n}[a, b]$, niin*

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, dx - \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}(p_n, p_n)$$

jollekin $\xi \in (a, b)$.

Todistus. Tarkastelemme Hermiten interpolaatio-ongelman (ks. luku 2 lause 2.2)

$$h(x_i) = f(x_i), \; h'(x_i) = f'(x_i), \quad \text{missä } i = 1, \ldots, n,$$

ratkaisua $h \in \Pi_{2n-1}$.

Koska $\deg(h) < 2n$, niin lauseen 4.4 nojalla

$$\int_a^b \omega(x)h(x)\,dx = \sum_{i=1}^n w_i h(x_i) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i).$$

Täten saamme virhetermille integraaliesityksen

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(x)f(x)\,dx - \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) &= \int_a^b \omega(x)f(x)\,dx - \int_a^b \omega(x)h(x)\,dx \\ &= \int_a^b \omega(x)(f(x) - h(x))\,dx.\end{aligned}$$

Polynomin $p_n(x) \in \Pi_n$ juuret ovat x_i. Nyt saamme lauseen 2.3 nojalla

$$f(x) - h(x) = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!}(x - x_1)^2 \cdots (x - x_n)^2 = \frac{f^{(2n)}(\zeta)}{(2n)!} p_n^2(x)$$

jollekin $\zeta = \zeta(x)$ välillä $I(x_1, \ldots, x_n, x)$. Tässä väli $I(x_1, \ldots, x_n, x)$ tarkoittaa pienintä avointa väliä, joka sisältää luvut $x_1, \ldots, x_n$ ja x. Lisäksi

$$\frac{f^{(2n)}(\zeta(x))}{(2n)!} = \frac{f(x) - h(x)}{p_n^2(x)}$$

on jatkuva välillä $[a, b]$, joten voimme käyttää integraalilaskennan yleistettyä väliarvolausetta. Tällöin

$$\int_a^b \omega(x)(f(x) - h(x))\,dx = \int_a^b \frac{\omega(x)f^{(2n)}(\zeta(x))}{(2n)!} p_n^2(x)\,dx = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}(p_n, p_n)$$

jollekin luvulle $\xi \in (a, b)$. □

Kun vertaamme Newton-Cotesin ja Gaussin integrointimenetelmiä, huomaamme, että Gaussin menetelmä on numeerisesti stabiili. Gaussin integrointikaavojen painot ovat aina positiivisia riippumatta pisteiden lukumäärästä n. Gaussin integrointimenetelmä antaa myös tarkimmat tulokset, jos laskennallinen työskentely on samanveroista molemmissa menetelmissä. Jos tietäisimme etukäteen, kuinka n pitäisi valita siten, että saavuttaisimme ennalta määrätyn tarkkuuden mille tahansa integraalille, Gaussin integrointimenetelmä olisi ylivoimainen verrattuna muihin numeerisiin integrointimenelmiin. Valitettavasti meillä ei kuitenkaan usein ole mahdollisuutta käyttää lausetta 4.7 tätä tarkoitusta varten, koska derivaatan korkean kertaluvun vuoksi tarvittavien pisteiden määrän ennalta arvioiminen voi olla vaikeata. Edellä mainittujen syiden takia sovellamme yleensä Gaussin integrointimenetelmää kasvavilla n:n arvoilla, kunnes peräkkäiset approksimaatiot täsmäävät tietylle tarkkuudelle. Koska emme yleensä voi käyttää luvulle n laskettuja funktion arvoja myös luvulle $n + 1$ (ainakaan klassisessa tapauksessa $\omega(x) \equiv 1$), menetämme nopeasti Gaussin integraatiomenetelmän ilmeiset edut.

4.4 Gaussin integrointikaavoista etukäteen määrätyillä luvuilla

Tässä aliluvussa tarkastelemme Gaussin integrointikaavoja, kun meillä on tietty määrä etukäteen määrättyjä lukuja (ks. [2, s. 101–106]). Tarkoitamme tällä kaavaa, joka on muotoa

$$\int_a^b \omega(x) f(x)\, dx \approx \sum_{k=1}^{m} a_k f(y_k) + \sum_{k=1}^{n} \omega_k f(x_k), \tag{4.16}$$

missä olemme kiinnittäneet ja määränneet luvut y_k etukäteen ja määritämme $m + 2n$ vakiota a_k, ω_k ja x_k siten, että sääntö on tarkka mahdollisimman korkea-asteiselle polynomille (eli polynomille, jonka aste on $m + 2n - 1$). Olkoot $r(x)$ ja $s(x)$ sellaisia polynomeja, että

$$r(x) = (x - y_1)(x - y_2)\cdots(x - y_m)$$

ja

$$s(x) = (x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_n).$$

Lause 4.8. *Sääntö* (4.16) *on tarkka kaikille polynomeille, joiden aste on pienempi tai yhtä suuri kuin $m + 2n - 1$, jos ja vain jos*

(a) *se on tarkka kaikille polynomeille, joiden aste on $\leq m + n - 1$,*

(b) *jos jokaisen polynomin $p(x)$ asteluku on korkeitaan $n - 1$, niin tällöin*

$$\int_a^b \omega(x) r(x) s(x) p(x)\, dx = 0.$$

Todistus. Lauseen 4.8 kohdan (a) välttämättömyys on triviaalia. Olkoon polynomi $p(x)$ astetta $\deg(p(x)) \leq n-1$. Tällöin polynomi $t(x) = r(x)s(x)p(x)$ on polynomi, jonka aste on korkeintaan $m + 2n - 1$. Täten, jos kaava (4.16) on tarkka polynomille $t(x)$, niin

$$\int_b^a \omega(x) t(x)\, dx = \sum_{k=1}^{m} a_k t(y_k) + \sum_{k=1}^{n} \omega_k t(x_k).$$

Mutta nyt on voimassa $t(y_k) = 0$, missä $k = 1, 2, \ldots, m$, ja $t(x_k) = 0$, missä $k = 1, 2, \ldots, n$. Täten kohdan (b) välttämättömyys seuraa.

Oletetaan kääntäen, että kohdat (a) ja (b) pitävät paikkansa. Olkoon $t(x)$ polynomi, jonka aste on korkeintaan $m + 2n - 1$. Tällöin kyseinen polynomi voidaan kirjoittaa muodosssa $t(x) = r(x)s(x)q(x) + v(x)$, missä $q(x)$ on polynomi korkeintaan astetta $n-1$ ja $v(x)$ on polynomi, jonka aste on korkeintaan

$m+n-1$. Nyt on voimassa, että $t(y_k) = v(y_k)$, missä $k = 1, 2, \ldots, m$, ja $t(x_k) = v(x_k)$, missä $k = 1, 2, \ldots, n$. Tällöin saamme

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(x)t(x)\,dx &= \int_a^b \omega(x)[r(x)s(x)q(x) + v(x)]\,dx \\ &= \int_a^b \omega(x)v(x)\,dx,\end{aligned}$$

sillä kohdan (b) nojalla $\int_a^b \omega(x)r(x)s(x)q(x)\,dx = 0$. Mutta kohdasta (a) saamme, että

$$\begin{aligned}\int_a^b \omega(x)v(x)\,dx &= \sum_{k=1}^{m} a_k v(y_k) + \sum_{k=1}^{n} \omega_k v(x_k) \\ &= \sum_{k=1}^{m} a_k t(y_k) + \sum_{k=1}^{n} \omega_k t(x_k).\end{aligned}$$

Tämä todistaa riittävyyden. □

Jotta voisimme edetä numeerisesti, meidän täytyy määritellä polynomit $s(x) = (x - x_1)\cdots(x - x_n)$ ortogonaalisina polynomeina välillä $[a, b]$ painon $\omega(x)r(x)$ suhteen. Tällöin saamme Gaussin integrointimenetelmän pohjaksi kyseiset polynomit siten, että niiden ortogonaalisuusrelaatioissa esiintyvät painofunktiot ovat integrandin tekijöinä.

Lause 4.9. *Olkoot $p_n(x)$, missä $n = 0, 1, \ldots,$ ortonormaalisia polynomeja välillä $[a, b]$ painon $\omega(x)$ suhteen. Olkoon*

$$r(x) = (x - y_1)(x - y_2)\cdots(x - y_m) \geq 0$$

välillä $[a, b]$. Oletetaan, että luvut y_i ovat erillisiä. Oletetaan lisäksi, että polynomit $q_n(x)$, missä $n = 0, 1, \ldots,$ ovat ortogonaalisia polynomeja välillä $[a, b]$ painon $\omega(x)r(x)$ suhteen. Tällöin

$$r(x)q_n(x) = \begin{vmatrix} p_n(x) & p_{n+1}(x) & \cdots & p_{n+m}(x) \\ p_n(y_1) & p_{n+1}(y_1) & \cdots & p_{n+m}(y_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_n(y_m) & p_{n+1}(y_m) & \cdots & p_{n+m}(y_m) \end{vmatrix}. \tag{4.17}$$

Todistus. On selvää, että kaavan (4.17) oikea puoli kuuluu joukkoon Π_{n+m}. Lisäksi oikea puoli katoaa, kun $x = y_1,\ x = y_2, \ldots, x = y_m$ eli determinantin vaakarivit ovat yhtä suuret. Täten se voidaan kirjoittaa muodossa $r(x)q_n(x)$, missä $q_n(x) \in \Pi_n$.

Osoitamme seuraavaksi, että polynomi $q_n(x)$ on ortogonaalinen eli kohtisuorassa kaikkia joukon Π_{n-1} alkioita vastaan painon $\omega(x)r(x)$ suhteen. Olkoon $q(x) \in \Pi_{n-1}$. Koska $r(x)q_n(x)$ on selvästi tietty lineaarikombinaatio polynomeista $p_n(x), \ldots, p_{n+m}(x)$, niin saamme

$$r(x)q_n(x) = c_1 p_n(x) + \cdots + c_{m+1} p_{n+m}(x).$$

Saamme, että

$$\int_a^b \omega(x)r(x)q_n(x)q(x)\,dx = \int_a^b \omega(x)[c_1 p_n(x) + \cdots + c_{m+1}p_{n+m}(x)]q(x)\,dx = 0,$$

sillä jokainen ortonormaali polynomi on ortogonaalinen alemman asteen polynomien suhteen.

Lopuksi osoitamme, että polynomin $q_n(x)$ aste on täsmälleen n. Saamme osoitettua tämän näyttämällä, ettei polynomin $p_{n+m}(x)$ kerroin c_{m+1} ole nolla. Tämä kerroin on

$$c_{m+1} = \begin{vmatrix} p_n(y_1) & p_{n+1}(y_1) & \cdots & p_{n+m-1}(y_1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_n(y_m) & p_{n+1}(y_m) & \cdots & p_{n+m-1}(y_m) \end{vmatrix}. \tag{4.18}$$

Jos olisi $c_{m+1} = 0$, löytäisimme vakiot $d_1, d_2, \ldots, d_m$, joista kaikki eivät ole nollia, siten, että polynomi

$$s(x) = d_1 p_n(x) + d_2 p_{n+1}(x) + \cdots + d_m p_{n+m-1}(x) \tag{4.19}$$

katoaisi, kun $x = y_1, x = y_2, \ldots, x = y_m$. Nyt polynomi $s(x)$ olisi muotoa $s(x) = r(x)t(x)$, missä $t(x) \in \Pi_{n-1}$. Lisäksi $s(x)$ olisi tietenkin ortogonaalinen kaikkien joukon Π_{n-1} alkioiden suhteen. Tästä seuraisi, että

$$0 = \int_a^b \omega(x)s(x)t(x)\,dx = \int_a^b \omega(x)r(x)t^2(x)\,dx.$$

Tällöin $t(x) \equiv 0$ huomautuksen 4.1 nojalla. Tämä on ristiriidassa sen kanssa, että kaikki luvut d_i eivät ole nollia. □

Jos otamme integrointivälin päätepisteet mukaan kahteen yleisimpään Gaussin integrointisääntöön ja valitsemme painoiksi $\omega(x) = 1$ ja loput pisteet x_k siten, että saamme mahdollisimman korkean kertaluvun menetelmälle, päädymme Radaun ja Lobatton integrointiin. (Ks. [2, s. 103–104]). Esitämme nämä lauseina 4.10 ja 4.11.

Lause 4.10 (Radaun integrointi)**.** *Olkoon funktio $f(x) \in C^{2n-1}[-1,1]$. Tällöin*

$$(4.20)\qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{2}{n^2} f(-1) + \sum_{j=1}^{n-1} \omega_j f(x_j) + E,$$

missä x_j on j:s nolla lausekkeessa

$$(4.21)\qquad \frac{P_{n-1}(x) + P_n(x)}{x-1}, \quad P(x) = \text{Legendren polynomi (ks. luku 4.2)},$$

missä

$$(4.22)\qquad \omega_j = \frac{1}{n^2}\frac{1-x_j}{[P_{n-1}(x_j)]^2} = \frac{1}{1-x_j}\frac{1}{[P'_{n-1}(x_j)]^2},$$

ja missä

$$(4.23)\quad E = E(f) = \frac{2^{2n-1}n}{[(2n-1)!]^3}[(n-1)!]^4 f^{(2n-1)}(\xi), \quad \text{missä } -1 < \xi < 1.$$

Seuraavassa lauseessa esitämme Lobatton integroinnin.

Lause 4.11 (Lobatton integrointi)**.** *Olkoon $f(x) \in C^{2n-2}[-1,1]$. Tällöin*

$$(4.24)\qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{2}{n(n-1)}[f(1) + f(-1)] + \sum_{j=2}^{n-1} \omega_j f(x_j) + E,$$

missä x_j on polynomin $P'_{n-1}(x)$ $(j-1)$:s nollakohta, kun $P(x)$ on Legendren polynomi. Tässä kaavassa (4.24) *luvuille ω_j ja E pätee, että*

$$(4.25)\qquad \omega_j = \frac{2}{n(n-1)[P_{n-1}(x_j)]^2}, \quad \text{missä } x_j \neq 1, x_j \neq -1,$$

ja

(4.26)

$$E = E(f) = \frac{-n(n-1)^3 2^{2n-1}[(n-2)!]^4}{(2n-1)[(2n-2)!]^3} f^{(2n-2)}(\xi), \text{ missä } -1 < \xi < 1.$$

Radaun ja Lobatton integrointisäännöt ovat usein hyödyllisiä approksimoinnissa seuraavissa tilanteissa (vrt. [2, s. 104–105]).

(1) Funktio saa pisteessä 1 tai -1 yksinkertaisen arvon, esimerkiksi nollan.

(2) Radaun kaava on hyödyllinen, kun ratkaisemme tavallisen yhden muuttujan differentiaaliyhtälön

$$y' = f(x, y) \tag{4.27}$$

seuraavasti

$$\begin{aligned} y(1) &= y(-1) + \int_{-1}^{1} f(x, y)\, dx \\ &\approx y(-1) + \frac{2}{n^2} f(-1, y(-1)) + \sum_{i=1}^{n-1} w_i f(x_i, y(x_i)). \end{aligned} \tag{4.28}$$

Tässä luvut x_i ovat Radaun integrointisäännön lukuja ja ω_i vastaavia painoja. Jos laskemme arvot $f(x_i, y(x_i))$ jollakin standardimenetelmällä, niin ylläoleva approksimaatio ”parantaa” termin $y(1)$ arvoa.

Lopuksi annamme esimerkin Radaun ja Lobatton integrointisäännöistä eri integrandeilla.

Esimerkki 4.2. Olkoot L_4 Lobatton neljän pisteen sääntö, L_{10} Lobatton kymmenen pisteen sääntö, R_6 Radaun kuuden pisteen vasemman puoleinen sääntö ja $\bar{R}_6$ kuuden pisteen oikean puoleinen sääntö. Näissä säännöissä esimerkiksi neljän pisteen säännössä $n = 4$ ja kymmenen pisteen säännössä $n = 10$. Radaun vasemman puoleisella säännöllä tarkoitamme, että olemme valinneet pisteet integrointivälin osavälien vasemmalta puolelta. Vastaavasti Radaun oikean puoleisella säännöllä tarkoitamme, että olemme valinneet pisteet integrointivälin osavälien oikealta puolelta. Alla oleviin taulukkoihin olemme koonneet sääntöjä vastaavia tuloksia eri integrandeilla.

Taulukko 3: Sääntöjä vastaavia tuloksia.

Sääntö	$\int_0^1 x^{\frac{1}{2}}\, dx$	$\int_0^1 x^{\frac{3}{2}}\, dx$	$\int_0^1 \frac{1}{1+x}\, dx$	$\int_0^1 \frac{1}{1+x^4}\, dx$
L_4	$0,6568\,2580$	$0,4003\,5217$	$0,6931\,8182$	$0,8662\,6092$
L_{10}	$0,6661\,9841$	$0,4000\,0199$	$0,6931\,4718$	$0,8669\,7299$
R_6	$0,6648\,0585$	$0,4000\,2032$	$0,6931\,4718$	$0,8669\,7523$
$\bar{R}_6$	$0,6671\,5566$	$0,3999\,8857$	$0,6931\,4718$	$0,8669\,7059$
Tarkka arvo	$0,6666\,6667$	$0,4000\,0000$	$0,6931\,4718$	$0,8669\,72987$

Taulukko 4: Sääntöjä vastaavia tuloksia.

Sääntö	$\int_0^1 \frac{1}{1+e^x}\,dx$	$\int_0^1 \frac{2}{2+\sin 10\pi x}\,dx$
L_4	$0,3798\,8574$	$1,1072\,9967$
L_{10}	$0,3798\,8549$	$1,1911\,9517$
R_6	$0,3798\,8549$	$1,3258\,4956$
$\bar{R}_6$	$0,3798\,8549$	$0,8793\,0050$
Tarkka arvo	$0,3798\,8549$	$1,1547\,0054$

Kun tarkastelemme n:n pisteen Gaussin säännön G_n ja $n-1$:n pisteen Lobatton säännön virhetermejä (ks. lauseet 4.7 ja 4.11), huomaamme, että termien $f^{(2n)}(\xi)$ kertoimet näissä kahdessa säännösssä ovat melkein samat ja vastakkaismerkkiset. Tällöin jos $f^{(2n)}$ ei muuta merkkiänsä integrointivälillä, niin integraalin $I(f)$ arvo on näiden kahden arvon välillä. Painotetulla keskiarvolla

$$\frac{n+1}{2n+1}G_n + \frac{n}{2n+1}L_{n+1}$$

saamme yleensä paremman approksimaation integraalin $I(f)$ arvolle kuin kummallakaan säännöllä G_n tai L_{n+1}. Kun luvun n arvo on suuri ja funktio on hyvin käyttäytyvä, tämä pitää yleisesti paikkansa.

Viitteet

[1] Abramowitz, M., and Stegun, I. A., *Handbook of Mathematical Functions.* National Bureau of Standards, Applied Mathematics series 55. 6th ed. Washington DC.: U.S. Government Printing Office, 1967.

[2] Davis, P.J., and Rabinowitz P., *Methods of numerical integration*, 2nd ed. The United States of America: Academic Press, Inc., 1984.

[3] Kincaid, D., and Cheney, W., *Numerical Analysis*, International Student Edition. The United States of America: Wadsworth, Inc., 1991.

[4] Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., *Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing.* The United States of America: The Cambridge University Press, 1986.

[5] Steffensen, J. F., *Interpolation*, 2nd ed. New York: Chelsea Publishing Co., 1950.

[6] Stoer, J., and Bulirsch, R., *Introduction to numerical analysis*, The United States of America: Springer-Verlag New York Inc, 1980.