6 Numeerinen integrointi

6.1 Monte Carlo

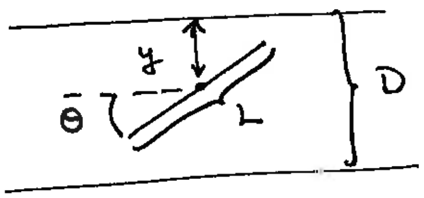
Keskeinen raja-arvolause: Olkoot X_i i.i.d. satunnaismuuttujia, ka μ, varianssi σ^2. Tällöin ka:lle $A_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i$ pätee

$$\mathrm{var}(A_N) = \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{var}(X_i) = \frac{\sigma^2}{N}$$

Keskihajonnalla σ on sama yksikkö: $\sigma(A_N) = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$.

Suppenemisnopeus Monte Carlo-menetelmillä on siis luokkaa $O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right)$, missä N on integroimispisteiden lkm. Merkittävää on, että näin on dimensiosta riippumatta!

Buffonin neula:

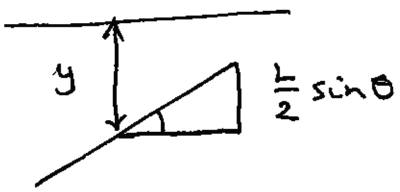


Kahden viivan välinen etäisyys on D. Millä tn L-pituinen neula leikkaa viivoja?

Neulan kp:n etäisyys lähimmästä viivasta olkoon y ja kulma θ.

Valitaan $L = D = 1$; y ja θ satunnaisia jakaumilla

$$y \sim \mathrm{Unif}(0, \tfrac{1}{2}), \quad \theta \sim \mathrm{Unif}(0, \pi).$$



Leikkausehto: $y \leq \frac{1}{2}\sin\theta$

Todennäköisyyden määrittäminen edellyttää pinta-alojen suhteen laskemista: Mahdollisia konfiguraatioita ovat pisteet $[0,\pi]\times[0,1/2]$ eli pinta-ala $\pi/2$, ehdon toteuttavat $\int_0^\pi \frac{1}{2}\sin\theta\, d\theta = 1$;

$$p = \frac{1}{(\pi/2)} = \frac{2}{\pi}$$

Saamme siis approksimaation: $\pi \approx 2\left(\frac{\text{heittojen lkm}}{\text{leikkausten lkm}}\right)$

Esimerkki 6.1.1 Vaikea geometria

$$I = \iiint_V \gamma(x,y,z)\, dx\, dy\, dz \,,$$ V on epäyhtälöiden määrittämä

$$\begin{cases} xyz \le 1, & -5 \le x \le 5, \\ & -5 \le y \le 5, \\ & -5 \le z \le 5. \end{cases}$$

Olkoon tiheys $\gamma(x,y,z) = e^{z/2}$.

Tiheyden eksponentiaalinen jakauma aiheuttaa sen, että tilavuuden ja massan integraalit yli saman alueen V suppenevat eri tavalla: tilavuuden keskihajonta on pienempi.

Usein sopiva muuttujanvaihdos muuttaa tilanteen:

$$u = e^{\frac{1}{2}z} \quad : -5 \le z \le 5 \longrightarrow e^{-2.5} \approx 0.08 \le u \le e^{2.5} \approx 12.2$$

$$I = 2 \int_{e^{-2.5}}^{e^{2.5}} \int_{-5}^{5} \int_{-5}^{5} \begin{cases} 0, & 2xy \ln u > 1 \\ 1, & 2xy \ln u \le 1 \end{cases} dx\, dy\, du$$

Normaalisti keskihajonnan puolittaminen vaatii integroimispisteiden nelinkertaistamisen.
Tehtävään sovitettu jakauma on usein tehokkaampi.

Esimerkki 6.1.2 Korkea dimensio

Tarkastellaan yleistä tapausta :

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \cdots \int_{a_m}^{b_m} f(x_1, x_2, \ldots, x_m)\, dx_m \ldots dx_2\, dx_1 \,, \quad \left(\iint_V \cdots \int f \, dV \right)$$

missä sisempien integraalien rajat voivat olla ulompien muuttujien funktioita : $a_2 \equiv a_2(x_1)$, $b_m \equiv b_m(x_1, \ldots, x_{m-1})$

Kuten edellä, jokaiselle dimensiolle saadaan ympäröivän tilavuuden rajat (min/max) : $[A_1, B_1]$, $[A_2, B_2]$, ...
ja $\hat{V} = [A_1, B_1] \times [A_2, B_2] \times \ldots \times [A_m, B_m]$.

Määritellään funktio g s.e.

$$g(x_1, x_2, \ldots, x_m) = \begin{cases} 0, & \text{jos } (x_1, \ldots, x_m) \in \hat{V} \setminus V \\ f, & \text{jos } \quad " \quad \in V \end{cases}$$

$$I \approx \sum_{i=1}^{N} g_i \left(\frac{|\hat{V}|}{N} \right), \quad \text{missä } |\hat{V}| = (B_1 - A_2) \ldots (B_m - A_m)$$

Korkean dimension tehtävät ovat hyvin ajankohtaisia. Monte Carlo -menetelmät ovat luonnollisia, mutta hidas suppeneminen on kuitenkin ongelmallista.

Esimerkki 6.1.4 MATLAB ; Toinen estimaatti π:lle

Ympyrän pinta-ala : $A = \pi r^2$

Asetetaan $r = 1$, jolloin $\hat{V} = [-1,1] \times [-1,1]$,

$$|\hat{V}| = 4 .$$

Laskuri :

$$g_i = \begin{cases} 1, & \text{jos piste on ympyrän sisäpuolella} \\ 0, & \text{muutoin} \end{cases}$$

Ohjelma : N = pisteiden lkm

```
numberin = 0
for i=1:N
    x = 2 * rand - 1
    y = 2 * rand - 2
    if x^2 + y^2 < 1
        numberin = numberin + 1
    end
end
pio4 = numberin / N
piapprox = 4 * pio4
```

$\longrightarrow$ pinta-alojen suhde $= \frac{\pi}{4}$

Hajonta ? $Var(aX) = a^2 Var(X)$

```
varpio4 = (pio4 - pio4^2) / N
varpi = 16 * varpio4
stdpi = sqrt(varpi)
```

; $Var(X_i) = E(X_i^2) - (E(X_i))^2$

Nyt $X_i^2 = X_i \quad (= g_i)$

6.2 Newton - Cotes

Idea: Approksimoidaan integraalia $\int_a^b f(x)\,dx$ funktion f interpolantin integraalilla.

Lagrange:
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \left(\prod_{\substack{j=0 \\ i \neq j}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) dx .$$

Tuttu puolisuunnikassääntö saadaan valinnella $n = 1$:

$$p_1(x) = f(a)\,\frac{x-b}{a-b} + f(b)\,\frac{x-a}{b-a} ,$$

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

Virhe on interpolaatiovirheen integraali; Trapetsille

$$\int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b p_1(x)\,dx = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi(x))\underbrace{(x-a)(x-b)}_{<0 \text{ yli välin}}\,dx$$
$$= \frac{1}{2} f''(\eta) \int_a^b (x-a)(x-b)\,dx$$
$$= -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\eta)$$

Yli n:n osavälin:
$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + f(x_n) \right]$$

ja virhe $O(h^2)$.

Entä $n=2$?

Vaaditaan: $\displaystyle\int_a^b f(x)\,dx \approx A_1 f(a) + A_2 f\left(\frac{a+b}{2}\right) + A_3 f(b)$,

tarkka kaikille polynomeille astetta 2 (tai alempi).

On ilmeistä, että kertoimet A_i saadaan kantapolynomien integraaleista.

Etenemme kuitenkin määräämättömien kertoimien avulla:

$$\int_a^b 1\,dx = b-a \quad \Rightarrow \quad A_1 + A_2 + A_3 = b-a$$

$$\int_a^b x\,dx = \frac{b^2-a^2}{2} \quad \Rightarrow \quad A_1 a + A_2 \frac{a+b}{2} + A_3 b = \frac{b^2-a^2}{2}$$

$$\int_a^b x^2\,dx = \frac{1}{3}(b^3-a^3) \Rightarrow A_1 a^2 + A_2 \left(\frac{a+b}{2}\right)^2 + A_3 b^2 = \frac{1}{3}(b^3-a^3)$$

Saadaan: $A_1 = A_3 = \dfrac{b-a}{6}$, $A_2 = \dfrac{4(b-a)}{6}$

Tämä on ns. Simpsonin sääntö:

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]$$

Yli n:n osavälin:

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{6}\Big[f(x_0) + 4f(x_{1/2}) + 2f(x_1) + \dots + 2\underbrace{f_{n-1}}_{=f(x_{n-1})} + 4\underbrace{f_{n-1/2}}_{=f(x_{n-1/2})} + f(x_n)\Big]$$

Entä virhe:

Yhdelle välille: $\dfrac{1}{2880}(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)$

ja n:lle osavälille $O(h^4)$.

Tarkka myös 3. asteen polynomeille!