

Ville Väänänen

Numeerinen integrointi: kvadratuureista kubatuureihin

Elektroniikan, tietoliikenteen ja automaation tiedekunta

Kandidaatintyö
Espoo 10.5.2010

Vastuupettaja:

Prof. Markus Turunen

Työn ohjaaja:

TkT Simo Särkkä



Aalto-yliopisto
Teknillinen korkeakoulu

Esipuhe

Espoo 10.5.2010

1cm

Sisältö

Esipuhe	iii
Sisällysluettelo	iv
1 Johdanto	1
2 Riemann integraali	3
2.1 Määritelmä	3
3 Numeerisia menetelmiä	4
3.1 Polynomiapproksimaatio	5
3.2 Newton-Cotes menetelmät	6
3.3 Gaussin kvadratuuri	8
3.3.1 Ortogonaaliset polynomit	9
3.3.2 Ominaisuuksia	10
3.3.3 Laskeminen	11
4 Kubatuurit	12
4.1 Tulosäännöt	13
4.2 Integroimisalueet	13
4.3 Kubatuurisääntöjä	13
4.3.1 Gauss-Hermite	13
5 Koeasetelma	13
6 Tulokset	13
7 Yhteenveto	13
Viitteet	14

1 Johdanto

Pinta-alojen ja tilavuuksien määrittäminen on yleisesti kohdattu ongelma matematiikan ja fysiikan sovelluksissa. Ei siis ole yllättävää, että jo kauan on tiedetty keinoja muuntaa pinta-aloja *kvadratuureiksi*, samansuuruisiksi suorakulmioiksi. *Integraali* on matemaattinen konstruktio, jolla on läheinen yhteys tähän ongelmaan. Tänä päivänä tekniikan alan ammattilaiset arkkitehteistä tilastotieteilijöihin tarvitsevat työssään tarkkoja ja tehokkaita keinoja integraalien määrittämiseen, sillä niitä joudutaan laskemaan esimerkiksi paljon käytetyssä elementtimenetelmässä sekä Bayes-mallinnuksen yhteydessä [12, 1].

Joillekin yksinkertaisille *integrandeille* $f(x)$ voidaan määrittää integraalifunktio $F(x)$ ($F'(x) = f(x)$) suljetussa muodossa, niin että se on ilmaistu algebrallisina lauseina sekä tunnettujen transkendenttien funktioiden avulla [8]. Tällaista integraalien määrittämistä kutsutaan myös symboliseksi integroinniksi ja sitä opetetaan esimerkiksi lukiossa, minkä vuoksi integraalifunktion määrittämistä saatetaan myös kutsua pelkästään integroinniksi.

Numeerinen integrointi on sovelletun matematiikan alalaji ja nimensä mukaisesti se tarjoaa työkaluja, joiden avulla integraaleille voidaan määrittää numeerisia likiarvoja. Alalta on aikojen saatossa julkaistu suunnaton määrä tutkimustuloksia ja kirjallisuutta, joten minkä tahansa käytännössä esiintyvän integraalin ratkaisemiseen voisi olettaa löytyvän laskennallisesti tehokas ratkaisualgoritmi [11]. Näin todennäköisesti onkin mikäli ongelmallinen integraali on määritelty ainoastaan yhdessä ulottuvuudessa, jolloin usein myös on mahdollista saavuttaa miltein mikä tahansa haluttu tarkkuus. Jos kuitenkin dimensioita on enemmän kuin yksi, jolloin puhutuaan *kubatuureista*, on ongelma, ehkä hieman yllättäen, kaikkea muuta kuin ratkaistu.

Numeerisen integroinnin menetelmät, joihin tässä työssä keskitytään, ovat muotoa

$$I[f] := \int_{\Omega} f(\mathbf{x})w(\mathbf{x}) \, d\Omega \approx Q[f] := \sum_{i=1}^N w_i f(\mathbf{x}_i) \quad (1)$$
$$E[f] = I[f] - Q[f]$$

jossa $I[f]$ on integraali (lineaarinen funktionaali), f on *integrandi*, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ on integroimisalue (yhdessä ulottuvuudessa integroimisväli), $Q[f]$ on kvadratuuri jos $n = 1$ ja kubatuuri jos $n \geq 2$, $w(\mathbf{x})$ on *painofunktio*, pisteet $\{\mathbf{x}_i\} \in \mathbb{R}^n$ ovat *solmut* tai *tukipisteet*, $\{w_i\} \in \mathbb{R}$ ovat *painot* ja E on integrointimenetelmän virhe. Vuonna 1814 saksalainen matemaatikko Carl Friedrich Gauss julkaisi merkittävän kaavan (??) mukaisen tuloksensa (tapaukselle $n = 1$ ja $w(x) := 1$), joka tunnetaan hänen mukaansa nimellä *Gaussin kvadratuuri* [5]. Kyseessä on elegantti kvadratuuri, jossa hyödynnetään *ortogonaalisia polynomeja* ja saavutetaan suuri tarkkuus pienellä funktio-evaluaatioiden määrällä. Tästä vaikuttuneena kirjoitti aikalaisensa Friedrich Bessel, myöskin tunnustettu matemaatikko, hänelle seuraavasti:

“Nyt kun olen saanut haltuuni numeerista integrointia käsittelevän paperinne, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvystä,

jonka olette minulle suoneet”[11]

Valitettavasti Gaussin tulos ei ole suoraan yleistettävissä useampaan ulottuvuuteen. Kuitenkin Vuonna 1877 James Clerk Maxwell esitteli 27-pisteisen, muotoa ?? olevan kubatuuri-säännön ja tätä pidetään ensimmäisenä varsinaisena esimerkkinä kubatuurista sellaisena kuin se tänä päivänä ymmärretään [3]. Useampiulotteisten integraalien likimääräiseen ratkaisemiseen on täysin eri tyyppisiäkin menetelmiä, joista tärkeimpänä mainittakoon erilaiset *Monte Carlo* -menetelmät. Näissä integrandin arvo lasketaan suuressa määrässä satunnaisia pisteitä, jolloin integraalia voidaan approksimoida näiden arvojen keskiarvona. Etuna on, että päästään tyystin eroon niin sanotusta *dimensionaalisuuden kirouksesta*, jonka vuoksi useissa muissa integroimismenetelmissä tarvittavien funktio-evaluaatioiden määrä riippuu eksponentiaalisesti dimensioiden määrästä. Hyväksyttävään tarkkuuteen pääseminen vaatii suurta määrää satunnaispisteitä ja funktio-evaluaatioita jo yhdessä dimensiossa. Kuitenkin dimensioiden määrän lähestyessä useita satoja, mikä on mahdollista esimerkiksi joissain finanssimatematiikan sovelluksissa, ovat Monte Carlo -menetelmät usein ainoa vaihtoehto [7]. Jatkossa keskitytään ainoastaan kaavan (??) mukaisiin sääntöihin.

Tässä työssä käydään ensin läpi tarvittavat esitiedot, kuten Riemann integraali ja polynominen approksimaatio, jotta voidaan esittää Gaussin kvadratuurien idea. Tämän jälkeen keskitytään integrointiin useammassa kuin yhdessä dimensiossa ja käydään läpi erilaisia keinoja kubatuuri-sääntöjen muodostamiseksi. Teoreettisen selvityksen jälkeen vertaillaan eräitä kiinnostavia menetelmiä keskenään soveltamalla niitä esimerkki-integraaleihin kahdessa dimensiossa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteella tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

2 Riemann integraali

Integraalille on olemassa useita kehittäjiensä mukaan nimettyjä määritelmiä, joista Riemann-integraali lienee yksinkertaisin ja intuitiivisin. Usein kun puhutaan integraalista tarkoitetaan nimenomaan Riemann-integraalia, mikä pätee myös tähän työhön. Jos reaaliarvoinen funktio $f(\mathbf{x})$ on jatkuva (lukuunottamatta äärellistä määrää epäjatkuvuuspisteitä) ja rajoitettu integroimisalueessa $[a, b]$, on sille määritelty Riemann-integraali, jota merkitään $\int_a^b f(x) dx \in \mathbb{R}$ ja jota kutsutaan myös *määrätyksi integraaliksi*. Määrätyllä integraalilla ja *integraalifunktiolla* $F(x)$ (ja sitä kautta derivoinnilla) on läheinen yhteys, joka tunnetaan *analyysin ensimmäisenä peruslauseena*:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b F'(x) dx = F(b) - F(a) \quad (2)$$

Huomionarvoista on se, että määrätyn integraalin *olemassaolo* ei ole millään tavalla riippuvainen integraalifunktion $F(x)$ olemassaolosta.[2]

2.1 Määritelmä

Yhdessä ulottuvuudessa geometrisesti tarkasteltuna luku $\int_a^b f(x) dx$ tarkoittaa kuvaajan $y = f(x)$, x -akselin ja suorien $x = a$ ja $x = b$ rajaamaa pinta-alaa. Tämä on suora seuraus Riemann-integraalin määritelmästä. Olkoon

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

välin $[a, b]$ n -intervallinen jako, $|P| = \max_i \{x_i - x_{i-1}\}$ sen pisimmän intervallin pituus ja olkoon $\zeta_i \in [x_{i-1}, x_i]$ mikä tahansa piste intervallilla i . Tällöin summaa

$$\sum_{i=1}^n f(\zeta_i)(x_i - x_{i-1})$$

kutsutaan Riemann-summaksi. Tarkastellaan Riemann-summien S_k muodostamaa sarjaa, jonka jaoille P_k pätee $\lim_{k \rightarrow \infty} |P_k| = 0$. Nyt jos mikä tahansa näin muodostettu Riemann-summien sarja suppenee *yhteiseen* raja-arvoon S , eli $\lim_{k \rightarrow \infty} S_k = S$, niin

$$\int_a^b f(x) dx = S. \quad (3)$$

Eräitä Riemann-summia, tarkemmin sanottuna ala- ja yläsummia, on havainnollistettu kuvassa 1 (jaon ei välttämättä tarvitse olla tasavälinen), josta on helppo nähdä, että jaon tihentyessä summat suppenevat samaan arvoon, joka vastaa kuvaajan $y = f(x)$ ja x -akselin rajaamaa pinta-alaa.[4]

Jos integrandi on tai integroimisväli ovat rajoittamattomia, jolloin integraalia kutsutaan *epäoleelliseksi*, voidaan integraali määritellä tavallisten integraalien raja-arvoina, mikäli nämä ovat olemassa. Esimerkiksi

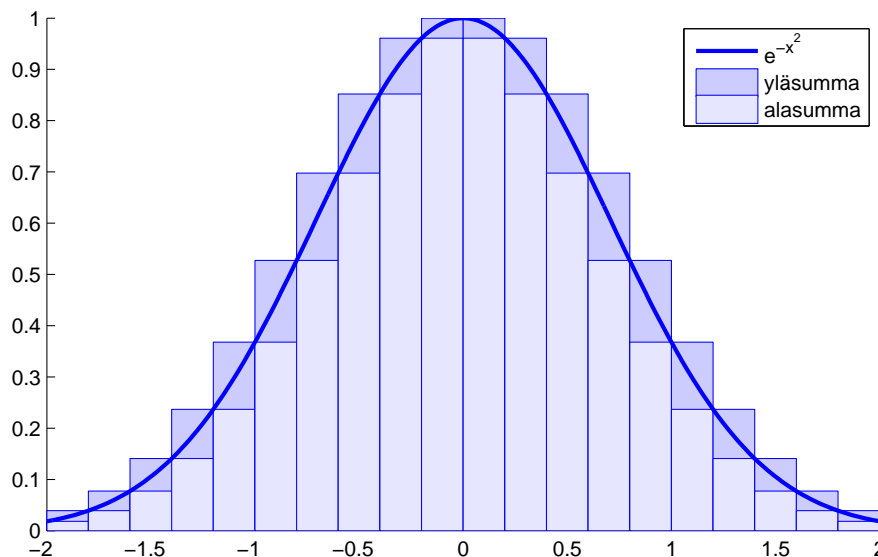
$$\int_a^\infty f(x) dx = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_a^r f(x) dx,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}} f(x) dx = \int_{-\infty}^0 f(x) dx + \int_0^{\infty} f(x) dx$$

ja jos $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \infty$, niin

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{r \rightarrow a^+} \int_r^b f(x) dx.$$

Kuten jo kaavasta (??) voidaan päätellä, usein yksinkertaisen integraalin $\int_a^b f(x) dx$ sijaan on kohdataan *painotettuja* integraaleja $\int_a^b f(x)w(x) dx$. Jos integroimissääntö $Q[f]$ on määritelty jonkin painofunktion $w(x)$ suhteen, se on “lukittu” ja ainoastaan funktiota $f(x)$ voidaan varioida. Tässä työssä painofunktio oletetaan aina ei-negatiiviseksi ja rajoitetuksi. Jos painofunktio on normalisoitu siten että $\int_{\mathbb{R}} w(x) dx = 1$, painofunktiota kutsutaan jakaumaksi ja $\int_a^b f(x)w(x) dx$ on tällöin painotettu keskiarvo.



Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

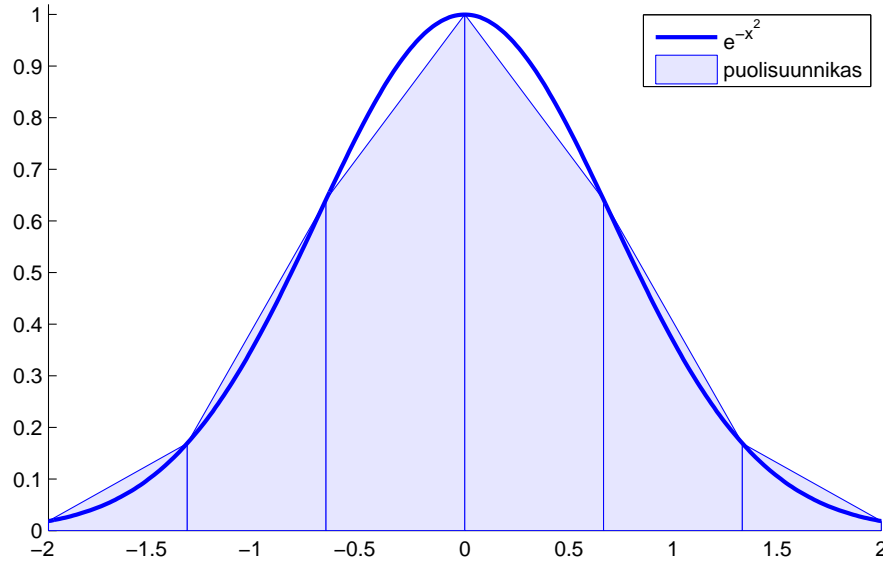
3 Numeerisia menetelmiä

Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakaide-menetelmä* [11]. Kuvan 1 esittämässä tapauksessa saadaan $L_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.57$ ja $U_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.96$, todellisen arvon ollessa $\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx \approx 1.76$. Tulosta voidaan hiukan parantaa valitsemalla suorakulmion i korkeudeksi $f(\frac{x_i+x_{i+1}}{2})$.

Selkeä parannus saadaan aikaiseksi *puolisuunnikkamenetelmällä*, jossa myös käytetään tasavälistä jakoa $P_n = \{x_i \mid x_i = a + hi\}$, mutta suorakulmiot on korvattu puolisuunnikkailla:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(x_k) + f(x_{k+1})) \quad (4)$$

Puolisuunnikasmenetelmää on havainnollistettu kuvassa 2.[5]



Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

Sekä suorakulmiomenetelmä, että puolisuunnikasmenetelmä voidaan tulkita siten, että integrandia approksimoidaan jokaisella välillä vakiofunktioilla (0:nneen asteen polynomi) tai vastaavasti ensimmäisen asteen polynomilla. Alkuperäinen integraali on siis n :n polynomintegraalin summa. Tällaisen tulkinnan siivittämänä näille menetelmille löytyy ilmeinen parannusehdotus: käytetään approksimointiin korkeamman asteen polynomia.[5]

3.1 Polynomiapproksimaatio

Yleinen *approksimaatio-ongelma* voidaan muotoilla seuraavasti: olkoon f approksimoitava funktio ja $\|\cdot\|$ normi, joka on määritelty halutunlaisia funktioita sisältävän vektorivaruuden, eli funktioavaruuden, Φ funktioille φ . Etsi $\hat{\varphi} \in \Phi$ siten että

$$\|f - \hat{\varphi}\| \leq \|f - \varphi\| \quad \forall \varphi \in \Phi.[5] \quad (5)$$

Normin valinta määrää, missä mielessä mikäkin approksimaatio on optimaalinen. Yleisesti käytetty normi on funktioavaruuden L_2 (välillä $[a, b]$ Lebesgue mitalliset (pituus, pinta-ala, tilavuus...) funktiot, joiden neliö on integroitava), normi

$$\|f(t)\|_{2,w} = \sqrt{\int_a^b w(t) |f(t)|^2 dt}, \quad (6)$$

jolloin puhutaan *pienimmän neliösumman* menetelmästä. Diskreetissä tapauksessa

$$\|f(t)\|_{2,w} = \sqrt{\sum_{i=1}^N Nw_i |f(t_i)|^2}. \quad (7)$$

Jos approksimaatioalue on diskreetti (tiedetään pisteet, jotka approksimaation on toteutettava) ja approksimaatiolle $\hat{\varphi}$ pätee $\|f - \hat{\varphi}\| = 0$, niin silloin $\hat{\varphi}(t_i) = f(t_i) \quad \forall i = 1, \dots, N$ ja sanotaan että $\hat{\varphi}$ *interpoloi* funktiota f pisteissä t_i . [5]

Polynomit $p(x) = a_m x^m + \dots + a_1 x + a_0 = \sum_{i=0}^m a_i x^i$, eli *monomien* $a_i x^i$ lineaarikombinaatiot, ovat yleisimmin käytettyjä approksimointifunktioita ja ylivoimaisesti suurin osa numeerisista integroimismenetelmistä perustuu integrandin approksimointiin polynomilla [4]. Tämä johtuu muun muassa siitä, että polynomien käyttäytyminen tunnetaan hyvin perinpohjaisesti sekä *Weierstrassin teoreemasta*, jonka mukaan mitä tahansa jatkuvaa funktiota voidaan approksimoida äärellisellä välillä mielivaltaisen tarkasti tarpeeksi korkea-asteisella polynomilla [4][5].

Polynomisessa interpolaatiossa $\Phi = \mathbb{P}_m$, eli vektoriavaruus, johon kuuluvat kaikki polynomit joiden asteluku $\text{Deg}(p) \leq m$. Halutaan siis löytää sellainen polynomi p , jolle pätee $p(x_i) = f(x_i) \quad \forall i$, kun $\{x_i\}$ on $n + 1$ erillistä pistettä ja $\{f(x_i)\} \in \mathbb{R}$ niitä vastaavat mielivaltaiset arvot. Osoittautuu että, p on aina olemassa, se on ainutkertainen ja $m \leq n$. [2]

Interpoloiva polynomi p voidaan konstruoida *Lagrange* muodossaan Lagrangen *kantapolynomien* ℓ_i avulla:

$$\ell_i(x) = \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^n \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right)$$

$$\implies \ell_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}.$$

Nyt jos p määritellään ℓ_i :n lineaarikombinaationa

$$p(x) = \sum_{i=0}^n \ell_i(x) y_i,$$

niin selvästi pätee

$$p(x_i) = \ell_i(x_i) y_i = y_i.$$

ja koska $\text{Deg}(\ell_i) = n$, niin myös $\text{Deg}(p) = n$.

3.2 Newton-Cotes menetelmät

Aiemmin esitellyssä puolisuunnikasmenetelmässä integrointiväli oli jaettu osaväleihin ja integrandia approksimoitiin ensimmäisen asteen polynomilla jokaisella osavälillä. Menetelmää, jossa samaa sääntöä käytetään toistuvasti usealla osavälillä, kutsutaan *paloittaiseksi* (eng. *compound* tai *composite*) [4]. Jos integrointiväli on jaettu

osaväleihin, seuraavassa tarkastelussa keskitytään ainoastaan yhteen osaväliin (joka sisältää $n + 1$ pistettä).

Jos nyt tasavälisellä jaolla $\{a = x_0, x_1 = a + h, \dots, x_{n-1} = a + (n-1)h, x_n = a + nh = b\}$ käytetään f :n tilalla edellä määriteltyä interpoloivaa polynomia p , saadaan

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &= \int_a^b p(x) \, dx + E_n(p) = \int_a^b \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i) \, dx + E_n(p) \\ &= \sum_{i=0}^n \left(f(x_i) \int_a^b \ell_i(x) \, dx \right) + E_n(p) \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_{k+i}) w_i + E_n(p) \end{aligned} \quad (8)$$

$$w_i = \int_a^b \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^n \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \, dx. \quad (9)$$

Tällä tavalla muodostetut menetelmät tunnetaan nimellä *Newton-Cotes* menetelmät ja ne poikkeavat toisistaan interpolaatiopisteiden lukumäärässä. Jos välin päätepisteet kuuluvat interpolaatiopisteiden joukkoon, menetelmää kutsutaan suljetuksi ja jos eivät, niin avoimeksi. [5]

Havaitaan, että mikäli kaavassa 8 valitaan $n = 1$, ja sovelletaan sitä toistuvasti usealla osavälillä, saadaan edellä esitelty puolisuunnikasmenetelmä (4). Jos taas valitaan $n = 2$, eli interpolaatioon käytetään kolmea pistettä, saadaan laajalti käytetty *Simpsonin* menetelmä: [5]

$$\begin{aligned} \int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x) \, dx &\approx \frac{h}{3} (f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})) \\ \implies \int_a^b f(x) \, dx &\approx \frac{h}{3} (f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(b)) \end{aligned}$$

Virheen $E_n(p)$ pienentämiseksi voidaan nähdä kaksi eri lähestymistapaa: joko käytetään pienen n :n Newton-Cotes kaavaa aina vain lyhyemmillä osaväleillä tai käytetään pidempiä osavälejä mutta suurta n :ää. Ensimmäisessä tapauksessa evaluointipisteiden määrä kasvaa nopeasti epäkäytännöllisen suureksi. Kuitenkin sekä puolisuunnikasmenetelmä että Simpsonin menetelmä ovat erittäin laajalti käytettyjä ja voidaan näyttää, että kun osavälien määrä $N \rightarrow \infty$ niin $E_n(p) \rightarrow 0$ kaikille integrointivälillä jatkuville funktioille. Toisessa tapauksessa $n : n$ kasvaessa suureksi, voivat painot w_i olla joko positiivisia tai negatiivisia ja absoluuttiselta arvoltaan milivaltaisen suuria, jolloin nämä menetelmät eivät enää ole numeerisessa mielessä stabiileja. Tämän vuoksi korkean tarkkuusasteen Newton-Cotes menetelmiä ei juurikaan käytetä. [6]

Sanotaan että kvadratuurisäännön (polynominen) *tarkkuusaste* on d , jos se antaa tarkan tuloksen kaikille polynomeille, jotka ovat korkeintaan astetta d , eli $E_n(p) = 0$, jos $\text{Deg}(p) \leq d$, mutta ei yhdellekään polynomille jonka $\text{Deg}(p) \geq d + 1$. Koska

Newton-Cotes menetelmissä integrandia interpoloidaan $n + 1$:ssä pisteessä astetta n olevalla polynomilla, niin $d_{NC} = n - 1$ ja Newton-Cotes kaavoja kutsutaan *interpolatorisiksi*. Tästä seuraa luonnollisesti kysymys, onko tarkkuuastetta mahdollista parantaa interpolatorista paremmaksi? Mikäli solmupisteet x_i ovat ennalta määrättyt, on interpolatorinen tarkkuusaste paras mahdollinen, mutta jos solmupisteet voidaan valita vapaasti, voidaan tarkkuusastetta parantaa.

3.3 Gaussin kvadratuuri

Tarkastellaan nyt kaavan (??) mukaista integroimissääntöä yhdessä ulottuvuudessa

$$\int_a^b f(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n f(x_i)w_i + E_n(f). \quad (10)$$

ja oletetaan että painot w_i on määritelty kuten aiemminkin, mutta painotettuna versiona

$$w_i = \int_a^b w(x)\ell_i(x) \, dx \quad (11)$$

Väli (a, b) voi olla ääretön, kunhan kaavan (10) integraali on määritelty ainakin jos $f(x)$ on polynomi. Riittää siis vaatia, integroinnin lineaarisuudesta johtuen, että integraali on määritelty kaikille monomeille, eli että painofunktion kaikki momentit μ_s

$$\mu_s = \int_a^b t^s \, dw(t), \forall s \in \mathbb{N} \quad (12)$$

ovat määritellyt [5]. Newton-Cotes kaavojen perusteella tiedetään, että mikäli on annetut mitkä tahansa n pistettä, niin voidaan määrittää kaava (10), jonka tarkkuusaste on $d = n - 1$. Voidaan kuitenkin osoittaa, että muotoa (10) olevan kvadratuurin maksimaalinen tarkkuusaste on $d = 2n - 1$, mikäli jokainen n :stä solmusta saadaan valita vapaasti [5].

Kuinka solmut x_i tulisi sitten valita? Tämän osoittamiseksi määritellään ensin *solmupolynomi*

$$\omega_n(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i) \in \mathbb{P}_n. \quad (13)$$

Nyt jos ja vain jos solmupolynomille pätee

$$\int_a^b \omega_n(x)p_{n-1}(x)w(x) \, dx = 0, \quad \forall p_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1} \quad (14)$$

niin kaavan (10) mukaisen kvadratuurin, jonka painot on laskettu kaavan (11) mukaisesti, tarkkuusaste on $d = 2n - 1$. Tämän todistamiseksi osoitetaan ensin ehdon (14) välttämättömyys, eli oletetaan että $d = 2n - 1$. Selvästi $\omega_n p_{n-1} \in \mathbb{P}_{2n-1} \quad \forall p \in \mathbb{P}_{n-1}$, jolloin

$$\int_a^b \omega_n(x)p_{n-1}(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n p_{n-1}(x_i)w_i = 0. \quad (15)$$

Toisaalta jos otetaan mikä tahansa $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$ ja oletetaan ehto (14), niin tällöin $p/\omega_n = q + r/\omega_n$ niin että $q, r \in \mathbb{P}_{n-1}$ ja

$$\int_a^b p(x)w(x) \, dx = \int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x) \, dx + \int_a^b r(x)w(x) \, dx. \quad (16)$$

Koska $q \in \mathbb{P}_{n-1}$ niin ehdon (14) nojalla

$$\int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x) \, dx = 0, \quad (17)$$

kun taas

$$\begin{aligned} \int_a^b r(x)w(x) \, dx &= \sum_{i=1}^n w_i r(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^n w_i (p(x_i) - q(x_i)\omega_n(x_i)) = \sum_{i=1}^n w_i p(x_i), \end{aligned}$$

joten

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x)w(x) \, dx &= \sum_{i=1}^n w_i p(x_i) \\ \implies E_n(p) &= 0. \end{aligned}$$

Eli sääntö on tarkka polynomeille, jotka ovat korkeintaan astetta $d = 2n - 1$. Toisaalta jos tarkastellaan esimerkiksi polynomia $\omega_n^2(x) \in \mathbb{P}_{2n}$ niin selvästi (muistetaan että $w(x) \geq 0$)

$$\int_a^b \omega_n^2(x)w(x) \, dx > 0,$$

mutta

$$\sum_{i=0}^n w_i \omega_n^2(x_i) = 0,$$

joten sääntö ei ole tarkka polynomeille astetta $2n$ [6].

3.3.1 Ortogonaaliset polynomit

Keskitytään nyt tarkastelemaan ehtoa (14). Sanotaan, että f ja g ovat *ortogonaaliset* w :n suhteen välillä $[a, b]$, jos

$$\int_a^b f(x)g(x)w(x) \, dx = 0, \quad (18)$$

eli niiden *sisätulo* $\langle f, g \rangle_w = 0$. Joukko $\{f_1, \dots, f_n\}$ on ortogonaalinen, mikäli kaikkien jäsenet ovat keskenään ortogonaalisia, eli

$$\langle f_i, f_j \rangle_w = 0 \quad \forall i \neq j$$

ja *ortonormaali* mikäli lisäksi pätee

$$\langle f_i, f_i \rangle_w = 1 \quad \forall i$$

Kaavasta (13) nähdään selvästi, että mikäli solmupolynomin määritelmä tunnettaisiin, saataisiin solmut x_i laskettua sen nollakohdista. Sisätulon ja ortogonaalisuuden määritelmien perusteella ehto (14) tarkoittaa solmupolynomin olevan sellainen polynomi $\omega_n \in \mathbb{P}_n$, joka on ortogonaalinen w :n suhteen kaikkia polynomeja $p_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$ kohtaan. Koska sisätulo on lineaarinen ja jos $\{e_0, \dots, e_{n-1}\}$ on jokin \mathbb{P}_{n-1} *kanta*, riittää että ω_n on ortogonaalinen kaikkia kantapolynomeja e_i kohtaan. Yleisesti käytettyjä kantapolynomeja ovat monomit x^i , joiden avulla eräs \mathbb{P}_{n-1} :n kanta on $\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$.

Mikä tahansa lineaarisesti riippumaton joukko, kuten esimerkiksi edellä esitelty monomikanta, on mahdollista ortogonalisoida *Gram-Schmidt*-proseduurin avulla [5, s.65]. Näin jokaista, edellä mainitut ehdot täyttävää, painofunktiota kohti on olemassa oma ortogonaalisten polynomien joukkonsa $\pi_{j,w}$ ($\text{Deg} \pi_j = j$, $j = 0, 1, 2, \dots$) ja $\omega_n = \pi_{n,w}$. Joitakin painofunktioita vastaavat ortogonaaliset polynomit tunnetaan *klassisina* ja ne on esitelty taulukossa 1. Solmupolynomin muodostaminen Gram-Schmidt-proseduurin avulla on työlästä ja monimutkaista. Lisäksi kun solmupolynomi on saatu selville, joudutaan vielä ratkaisemaan sen nollakohdat. Polynomin nollakohtien ratkaiseminen taas on tunnetusti laskennallisesti vaativaa ja siihen liittyvät algoritmit epästabiileja [10].

Tiedetään kuitenkin, että peräkkäiset ortogonaaliset polynomit $\pi_k(x)$ toteuttavat kolmiaskelisen rekursiokaavan:

$$\begin{aligned} \pi_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k)\pi_k(x) - \beta_k\pi_{k-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \\ \pi_0(x) &= 1, \quad \pi_{-1}(x) = 0 \end{aligned} \tag{19}$$

missä $\alpha_k \in \mathbb{R}$ ja $\beta_k > 0 \in \mathbb{R}$ riippuvat painofunktiosta.

Rekursiokaavasta (19) päästään suoraan tulokseen, jonka perusteella solmut x_i ja painot w_i saadaan laskettua tietyn Jaakobin-matriisin ominaisarvojen ja -vektorien avulla. Numeerisesta lineaarialgebrasta taas tunnetaan tehokkaita ratkaisualgoritmeja (kuten Lanczos-algoritmi) tällaisten ominaisarvo-ongelmien ratkaisemiseksi, joten myös Gaussin kvadratuureja voidaan laskea tehokkaasti, mikäli α_k ja β_k tunnetaan. [10]

3.3.2 Ominaisuuksia

Gaussin kvadratuurisääntö on optimaalinen kaavan (10) mukainen sääntö siinä mielessä, että sen polynominen tarkkuus on suurin mahdollinen. Tämän lisäksi sillä on muitakin haluttavia ominaisuuksia, kuten

1. Kaikki solmut x_i kuuluvat integroimisvälille $[a, b]$. Tämä on erittäin toivottava ominaisuus, joka ei aina ole saavutettavissa useammassa ulottuvuudessa.

Taulukko 1: Klassiset ortogonaaliset polynomit

$w(t)$	$[a, b]$	Nimi	Merkintä
1	$[-1, 1]$	Legendre	P_n
$(1 - t^2)^{-\frac{1}{2}}$	$[-1, 1]$	Tsebysev 1	T_n
$(1 - t^2)^{\frac{1}{2}}$	$[-1, 1]$	Tsebysev 2	U_n
$(1 - t)^\alpha(1 + t)^\beta$	$[-1, 1]$	Jaakob	$P_n^{(\alpha, \beta)}$
$t^\alpha e^{-t}$	$[0, \infty]$	Laguerre	$L_n^{(\alpha)}$
e^{-t^2}	$[-\infty, \infty]$	Hermite	H_n
1	$[-1, 1]$	Legendre	P_n

2. Kaikki painot w_i ovat positiivisia, koska

$$0 < \int_a^b \ell_i^2(x) w(x) dx = \sum_{k=1}^n w_k \ell_i^2(x_k) = w_i \quad \forall i = 1, \dots, n,$$

mikä tarkoittaa että kaava on numeerisesti stabiili.

3. Äärellisellä integroimisvälillä ja integroimisvälillä jatkuvalla integrandilla Gaussin kvadratuurisääntö supistuu integraalin tarkkaan arvoon, kun $n \rightarrow \infty$.

On tavallista että Gaussin kvadratuurisääntö on annettu jollekin äärelliselle integrointivälille $[c, d]$ (usein $[-1, 1]$), mutta sitä halutaan soveltaa toisella äärellisellä välillä $[a, b]$. Olkoon annettu sääntö $\sum_{i=0}^n w_i f(t_i)$, joka on määritelty välillä $[c, d]$. Käyttämällä muuttujanvaihdosta (affinimuunnos)

$$x = \left(\frac{b-a}{d-c} \right) t + \left(\frac{ad-bc}{d-c} \right),$$

saadaan uusi sääntö

$$\left(\frac{b-a}{d-c} \right) \sum_{i=0}^n w_i f \left(\left(\frac{b-a}{d-c} \right) t + \left(\frac{ad-bc}{d-c} \right) \right),$$

joka on määritelty välillä $[a, b]$. Toisin sanoen, on riittävää määritellä Gaussin kvadratuurisääntö mille tahansa vapaavalintaiselle välille. Tavallisesti valitaan väli $[-1, 1]$. [2, s.231]

3.3.3 Laskeminen

Näiden tietojen perusteella voimme esimerkinomaisesti laskea kolmipisteisen Gaussin kvadratuurin vakiopainofunktiolle $w(x) = P_n = 1$ ja välille $[-1, 1]$:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

$$\omega_3 = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) = x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0.$$

Nyt siis ω_3 :n täytyy olla ortogonaalinen polynomien $p(x) \in \mathbb{P}_2$, eli kannan $\{1, x, x^2\}$ jokaisen monomin kanssa, joten saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{cases} 0 = \int_{-1}^1 x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0 \, dx \\ 0 = \int_{-1}^1 x(x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0) \, dx \\ 0 = \int_{-1}^1 x^2(x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0) \, dx \end{cases},$$

jonka ratkaisu on $a_0 = a_2 = 0$ ja $a_1 = -\frac{3}{5}$, jolloin $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$. Painot w_i voitaisiin laskea kaavasta (11), mutta ne saadaan helpommin käyttämällä hyväksi tietoa, että etsimämme kvadratuuri on tarkka monomeille $1, x, x^2$. Näin saadaan toinen yhtälöryhmä painoille w_i :

$$\begin{cases} \int_{-1}^1 dx = 2 & = w_0 + w_1 + w_2 \\ \int_{-1}^1 x \, dx = 0 & = -\sqrt{\frac{3}{5}}w_0 + \sqrt{\frac{3}{5}}w_2, \\ \int_{-1}^1 x^2 \, dx = \frac{2}{3} & = \frac{3}{5}w_0 + \frac{3}{5}w_2 \end{cases}$$

jonka ratkaisu on $w_0 = w_2 = \frac{5}{9}$ ja $w_1 = \frac{8}{9}$. Etsimämme kvadratuuri on siis

$$\int_{-1}^1 f(x) \, dx \approx G_3(f(x)) = \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

. Muuttujanvaihdon $t = x + 1$ avulla voidaan edellä laskettua kvadratuuria käyttää välillä $[0, 2]$, jolloin soveltamalla sitä jo aiemmin tutkimaamme esimerkki-integrandiin $f(x) = e^{-x^2}$ ja hyödyntällä integrandin symmetrisyyttä y -akselin suhteen, saadaan tulokseksi

$$\begin{aligned} \int_{-2}^2 e^{-x^2} \, dx &= 2 \int_0^2 e^{-x^2} \, dx \approx 2G_3(e^{-(x+1)^2}) \approx 1.7577 \\ 2E_{G_3}(e^{-(x+1)^2}) &\approx 0.0064. \end{aligned}$$

Vastaavasti käyttämällä Simpsonin menetelmää samassa tilanteessa saadaan virheeksi

$$2E_S(e^{-x^2}) \approx 0.1043,$$

joka on yli 16 kertaa suurempi kuin Gaussin kvadratuurin virhe.

4 Kubatuurit

Kaiken kaikkiaan tähän mennessä on havaittu, että numeerinen integrointi yhdessä ulottuvuudessa on hyvin tunnettu ongelma, johon on tarjolla tehokkaita ratkaisuja. Ulottuvuuksissa $d \geq 2$ tilanne muuttuu ratkaisevasti. Ensinnäkin, yhdessä ulottuvuudessa on integrointisääntöjen kannalta vain yksi rajoitettu integroimisalue, koska

kaikki viivasegmentit ovat yhteneviä affiniimuunnoksella. Useammassa ulottuvuudessa erilaisia integroimisalueita (joita ei voi muuntaa toisikseen affiniimuunnoksella) on ääretön määrä. Toiseksi, yhdessä ulottuvuudessa ortogonaalipolynomien teoria on hyvin tunnettu ja siitä on huomattavaa apua kvadratuurien määrittämisessä. Toisin kuin usean muuttujan tapauksessa, jossa ortogonaalipolynomien teoria on huomattavasti monimutkaisempi ja heikommin tunnettu, eikä sen avulla ole onnistuttu muodostamaan kubatuurisääntöjä kuin harvoissa tapauksissa. [9, s.6-7]

Olkoon $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ ja $\mathbf{x}^\alpha = \prod_{i=1}^n x_i^{\alpha_i}$. Monen muuttujan polynomi $p(\mathbf{x})$ on monomien \mathbf{x}^α äärellinen lineaarikombinaatio

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} a_\alpha \mathbf{x}^\alpha \quad (20)$$

ja sen *algebrallinen asteluku* (myöhemmin pelkkä aste) on d , jos

$$d = \max \left\{ \sum_{i=1}^n |\alpha_i| \mid a_\alpha \neq 0 \right\}. \quad (21)$$

4.1 Tulosäännöt

4.2 Integroimisalueet

4.3 Kubatuurisääntöjä

4.3.1 Gauss-Hermite

5 Koeasetelma

6 Tulokset

7 Yhteenveto

Viitteet

- [1] S. Arasaratnam, Ienkan ja Haykin. Cubature Kalman Filters. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 54(6):1254–1269, kesäkuuta 2009.
- [2] D. Cheney, Ward ja Kincaid. *Numerical mathematics and computing*. Cengage Learning, 6 edition, 2007.
- [3] R. Cools. Constructing cubature formulae: the science behind the art. *Acta Numerica*, 6:1, marraskuuta 1997.
- [4] P. Davis, Philip J. ja Rabinowitz. *Methods of numerical integration*. Academic Press, 1975.
- [5] W. Gautschi. *Numerical analysis: an introduction*. Springer, 1997.
- [6] V. I. Krylov. *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962.
- [7] I. Kuo, Frances Y. ja Sloan. Lifting the curse of dimensionality. *Notices of the AMS*, 52(11):1320–1328, 2005.
- [8] R. Stoer, Josef ja Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*. Springer, 2 edition, 1993.
- [9] A. H. Stroud. *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [10] D. Trefethen, Lloyd Nicholas ja Bau. *Numerical linear algebra*. SIAM, 1997.
- [11] C. W. Ueberhuber. *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997.
- [12] R. j. Z. J. Zienkiewicz, OC ja Taylor. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Butterworth-Heinemann, 6 edition, 2005.