

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

<b>Esipuhe</b>	<b>iii</b>
<b>Sisällysluettelo</b>	<b>iv</b>
<b>1 Johdanto</b>	<b>1</b>
<b>2 Riemann integraali</b>	<b>3</b>
2.1 Geometrinen tulkinta . . . . .	3
<b>3 Numeerisia menetelmiä</b>	<b>4</b>
3.1 Polynomiapproksimaatio . . . . .	4
3.2 Newton-Cotes menetelmät . . . . .	6
3.3 Gaussin kvadratuuri . . . . .	8
3.3.1 Ortogonaalisista polynomeista . . . . .	10
<b>4 Kubatuurit</b>	<b>11</b>
4.1 Tulosäännöt . . . . .	11
4.2 Integroimisalueet . . . . .	11
4.3 Kubatuurisääntöjä . . . . .	11
4.3.1 Gauss-Hermite . . . . .	11
<b>5 Koeasetelma</b>	<b>11</b>
<b>6 Tulokset</b>	<b>11</b>
<b>7 Yhteenveto</b>	<b>11</b>
<b>Viitteet</b>	<b>12</b>

# 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 [9, 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 [7]. 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 [8]. 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

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

jossa  $f$  on *integrandi*,  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  on integroimisalue (yhdessä ulottuvuudessa integroimisväli),  $w(\mathbf{x})$  on *painofunktio*, pisteet  $\{\mathbf{x}_i\} \in \mathbb{R}^n$  ovat *solmut* tai *tukipisteet* ja  $\{w_i\} \in \mathbb{R}$  ovat *painot*. Vuonna 1814 saksalainen matemaatikko Carl Friedrich Gauss julkaisi merkittävän kaavan (1) 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 vaikutuneena kirjoitti aikalaisensa Friedrich Bessel, myöskin tunnustettu matemaatikko, hänelle seuraavasti:

“Nyt kun olen saanut haltuuni numeerista integrointia käsittelevän paperin, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvystä, jonka olette minulle suoneet”[8]

Valitettavasti Gaussin tulos ei ole suoraan yleistettävissä useampaan ulottuvuuteen. Kuitenkin Vuonna 1877 James Clerk Maxwell esitteli 27-pisteisen, muotoa 1

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. Jatkossa keskitytään ainoastaan kaavan (1) 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 dimensioissa. 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. Riemann-integraali on määritelty kaikille suljetulla välillä  $[a, b]$  melkein kaikkialla jatkuville ja rajoitetui reaaliarvoinen funktio on (Riemann-)integroituva ja integraalia merkitään  $\int_a^b f(x) \, dx \in \mathbb{R}$ , 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 Geometrinen tulkinta

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  $P_n = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b\}$  välin  $[a, b]$   $n$ -välinen jako,  $m_i = \inf\{f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1}\}$  funktion  $f(x)$  suurin alaraja ja  $M_i = \sup\{f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1}\}$  vastaavasti pienin yläraja välillä  $[x_i, x_{i+1}]$ . Jakoa  $P_i$  kutsutaan  $P_j$ :n *tihentymäksi* mikäli  $P_i \subset P_j$  ja merkitään  $|P_i|$  jaon  $P_i$  pisintä jakoväliä. Tällöin Riemann-integraali voidaan määritellä *ala-*

$$L_{P_n}(f) = \sum_{i=0}^n m_i(x_{i+1} - x_i)$$

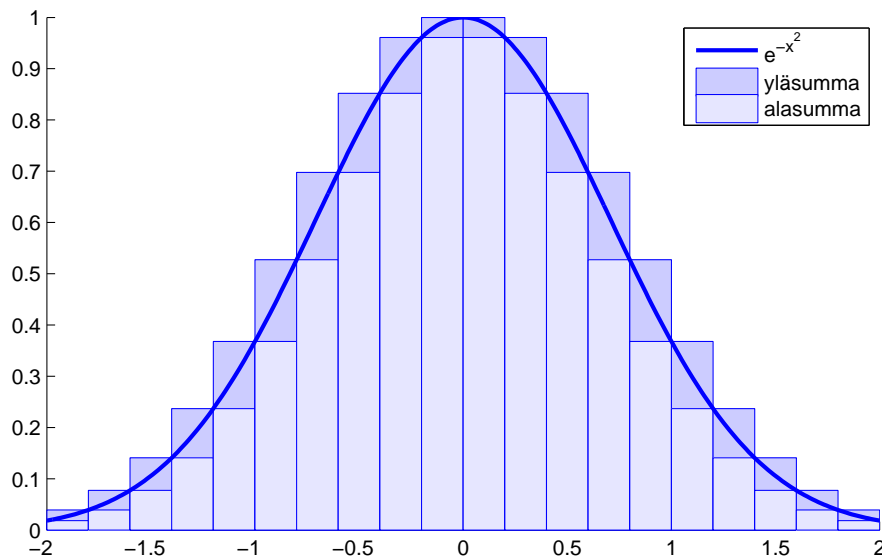
ja *yläsummien*

$$U_{P_n}(f) = \sum_{i=0}^n M_i(x_{i+1} - x_i)$$

avulla: jos pätee  $\lim_{n \rightarrow \infty} |P_n| = 0$ , niin

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} U_{P_n}(f) = \limsup_{n \rightarrow \infty} L_{P_n}(f) = S \implies \int_a^b f(x) \, dx = S \quad (3)$$

Ala- ja yläsummia on havainnollistettu kuvassa 1 (jaon ei välttämättä tarvitse olla tasavälinen), josta on helppo nähdä, että jaon tihentyessä ala- ja yläsummat suppenevat samaan arvoon, joka vastaa kuvaajan  $y = f(x)$  ja  $x$ -akselin rajaamaa pinta-alaa.[2]



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, *suorakulmio-menetelmä* [8]. 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 *puolisuunnikasmenetelmällä*, jossa myös käytetään tasavälistä jakoa  $P_n = \{x_i \mid x_i = a + hi\}$ , mutta suorakulmiot on korvattu puolisuunnikkailla:

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

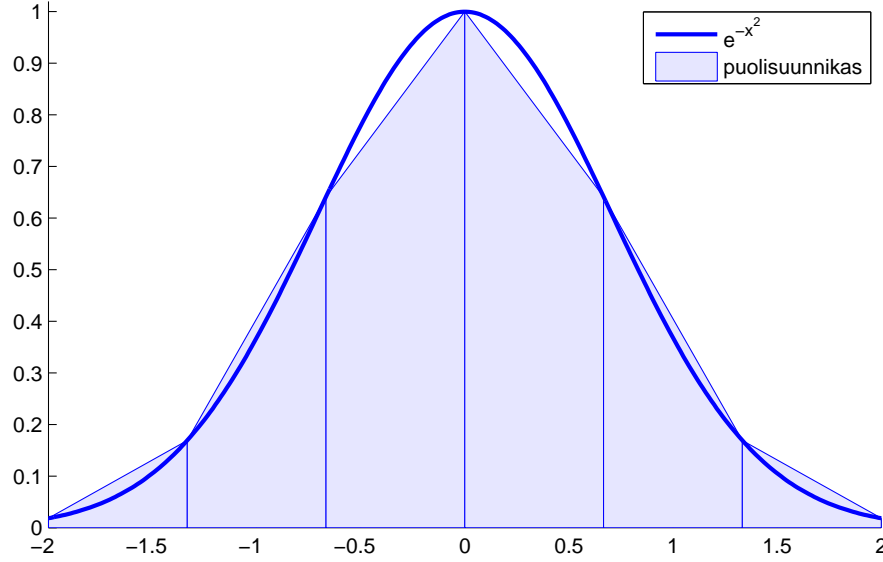
Puolisuunnikasmenetelmää on havainnollistettu kuvassa 2.[5]

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 parannusehdote: käytetään approksimointiin korkeamman asteen polynomia.[5]

#### 3.1 Polynomiapproksimaatio

Yleinen *approksimaatio-ongelma* voidaan muotoilla seuraavasti: olkoon  $f$  approksimoitava funktio ja  $\|\cdot\|$  normi, joka on määriteltä halutunlaisia funktioita sisältävän





Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

vektorivaruuden  $\Phi$  funktioille  $\varphi$ . Etsi  $\hat{\varphi} \in \Phi$  siten että

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

Jotta voitaisiin käsitellä sekä jatkuva että diskreetti tapaus samanaikaisesti, määritellään ensin jatkuva *mitta*  $d\lambda(t)$  seuraavasti:

$$\lambda(t) = \begin{cases} 0 & t < a \\ \int_a^t w(\tau) d\tau & a \leq t \leq b, \\ \int_a^b w(\tau) d\tau & t > b \end{cases} \quad (6)$$

jolloin  $d\lambda(t) = w(t)dt$  jos  $t \in [a, b]$  ja  $d\lambda(t) = 0$  jos  $t \notin [a, b]$ . Nyt voidaan jatkuvalla funktiolla  $u$  kirjoittaa

$$\int_{-\infty}^{\infty} u(t) d\lambda(t) = \int_{\mathbb{R}} u(t) d\lambda(t) = \int_a^b u(t)w(t) dt. \quad (7)$$

Kaavan (7) vasenta puolta kutsutaan yleisemmin *Riemann-Stieltjes*-integraaliksi ja kaava (7) siis kertoo sen yhteyden Riemann-integraaliin mikäli  $\lambda(t)$  (jota ei ole pakko määritellä kuten kaavassa (6)) on kaikkialla jatkuvasti derivoituva. Funktiota  $w(t)$  kutsutaan *painofunktioksi* (voi olla  $w(t) \equiv 1$ ) ja sen tulee olla määritelty siten, että  $\lambda(t)$  on määritelty. Tämä tarkoittaa myös, että väli  $[a, b]$ , eli  $d\lambda$ :n *kantaja*, voi olla ääretön, jos  $w$ :n integraali on määritelty tällä välillä. Jotta  $d\lambda$  olisi mitta, vaaditaan myös että  $w(t) \geq 0$  ja yhtäsuuruus sallitaan vain yksittäisissä pisteissä.

Diskreetti mitta saa nollasta poikkeavia arvoja  $w_i$  vain  $N$ :ssä pisteessä  $t_i$ , jolloin voidaan kirjoittaa vastaavasti  $\int_{\mathbb{R}} u(t) d\lambda(t) = \sum_{i=1}^N w_i u(t_i)$ .

Riemann-integroituville funktioille voidaan määritellä sisätulo  $\langle \cdot, \cdot \rangle : \Phi \times \Phi \rightarrow \mathbb{R}$  jatkuvassa tapauksessa alueessa  $[a, b]$  painofunktion  $w$  suhteen

$$\langle f, g \rangle_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x) dx \quad (8)$$

ja diskreettinä pisteissä  $x_i : i = 1, \dots, N$  painokertoimien  $w_i : i = 1, \dots, N$  suhteen

$$\langle f, g \rangle_w = \sum_a^b f(x_i)g(x_i)w_i. \quad (9)$$

Tällöin sisätulon indusoima normi on

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}. \quad (10)$$

Jos approksimaatioalue on diskreetti ja parhaalle approksimaatiolle  $\hat{\varphi}$  pätee  $\|f - \hat{\varphi}\|$ , 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 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*  $\ell_i$  avulla:

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

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

Nyt jos  $p$  määritellään  $\ell_i$ :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 *yhdistelmämenetelmäksi* (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

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &= \int_a^b p(x) \, dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i) \, dx + E_n(p) \\ &= \sum_{i=0}^n \left( f(x_i) \int_a^b \ell_i(x) \, dx \right) + E_n(p) \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_{k+i}) w_i + E_n(p) \end{aligned} \quad (11)$$

$$w_i = \int_a^b \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^n \left( \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \, dx. \quad (12)$$

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. Kaavassa 11 pisteitä  $x_i$  kutsutaan *solmuiksi* tai *tukipisteiksi* ja kertoimia  $w_i$  *painoiksi*. [5]

Havaitaan, että mikäli kaavassa 11 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 tarkkuusasteen Newton-Cotes kaavaa aina vain lyhyemmillä osaväleillä tai käytetään pidempiä osavälejä mutta suurta tarkkuusastetta. 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 muotoa 11 olevan kvadratuurin *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  $\text{Deg}(p) > d$ . 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 tarkkuusastetta 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

Jatkossa keskitytään muotoa

$$\int_a^b f(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n f(x_i)w_i + E_n(f) \quad (13)$$

oleviin kvadratuureihin, missä  $w$  on ei-negatiivinen painofunktio. Väli  $(a, b)$  voi olla ääretön, mikäli painofunktion kaikki momentit  $\mu_s$

$$\mu_s = \int_a^b t^s \, dw(t), \forall s \in \mathbb{N} \quad (14)$$

ovat määritellyt. Newton-Cotes kaavojen perusteella tiedetään, että mikäli on annettu mitkä tahansa  $n$  pistettä, niin voidaan määrittää kaava 13, jonka tarkkuusaste on  $d = n - 1$ . Voidaan kuitenkin osoittaa, että muotoa 13 olevan kvadratuurin maksimaalinen tarkkuusaste on  $d = 2n - 1$ , mikäli jokainen  $n$ :stä solmusta saadaan valita vapaasti.

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

$$\omega_n(x) = \prod_{i=1}^n (x - x_i). \quad (15)$$

Nyt jos ja vain jos solmupolynomille pätee

$$\int_a^b \omega_n(x)p_{n-1}(x)w(x) \, dx = 0, \quad \forall p_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1} \quad (16)$$

niin kaavan 13 mukaisen kvadratuurin tarkkuusaste on  $d = 2n - 1$ . Tämän todistamiseksi osoitetaan ensin ehdon 16 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

$$\int_a^b \omega_n(x)p_{n-1}(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n p_{n-1}(x_i)w_i = 0. \quad (17)$$

Toisaalta jos otetaan mikä tahansa  $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$  ja oletetaan ehto 16, niin tällöin  $p/\omega_n = q + r/\omega_n$  niin että  $q, r \in \mathbb{P}_{n-1}$  ja

$$\int_a^b p(x)w(x) \, dx = \int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x) \, dx + \int_a^b r(x)w(x) \, dx. \quad (18)$$

Koska  $q \in \mathbb{P}_{n-1}$  niin ehdon 16 nojalla

$$\int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x) \, dx = 0, \quad (19)$$

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 niin

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

mutta

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

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

Keskitytään nyt tarkastelemaan ehtoa 16. Sanotaan että  $f$  ja  $g$  ovat *ortogonaaliset*  $w$ :n suhteen, jos

$$\langle f, g \rangle_w = 0. \quad (20)$$

Kaavasta 15 havaitaan, että mikäli solmupolynomin määritelmä tunnettaisiin, saataisiin solmut  $x_i$  laskettua sen nollakohdista. Sisätulon ja ortogonaalisuuden määritelmien perusteella ehto 16 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 operaattori ja jos  $\{e_0, \dots, e_{n-1}\}$  on jokin  $\mathbb{P}_{n-1}$  *kanta*, riittää että  $\omega_n$  on ortogonaalinen kaikkia kantapolynomeja  $e_i$  kohtaan. Yleisesti käytettyjä kantapolynomeja ovat *monomit*  $x^i$ , joiden avulla eräs  $\mathbb{P}_{n-1}$ :n kanta on  $\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$ .

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

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x) \, dx &\approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) \\ \omega_3 &= (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) = x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0. \end{aligned}$$

Nyt siis  $\omega_3$ :n täytyy olla ortogonaalinen monomeja  $1, x, x^2$  vastaan, 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 12, mutta ne saadaan helpommin käyttämällä hyväksi tietoa, että etsimämme kvadratuuri on tarkka mm. 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

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

. Transformaation  $t = x + 1$  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.

### 3.3.1 Ortogonaalisista polynomeista

Ortogonaalisia polynomeja on tutkittu paljon ja tätä tietoutta voidaan käyttää hyväksi solmupolynomin  $\omega_n$  muodostamisessa ja sitä kautta solmujen  $x_i$  laskennassa. <Esittele tunnetuimmat ortogonaalisten polynomien luokat>

## 4 Kubatuurit

### 4.1 Tulosäännöt

### 4.2 Integroimisalueet

### 4.3 Kubatuurisääntöjä

#### 4.3.1 Gauss-Hermite

## 5 Koeasetelma

## 6 Tulokset

## 7 Yhteenveto

## Viitteet

- [1] I. Arasaratnam and S. Haykin. Cubature Kalman Filters. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 54(6):1254–1269, kesäkuuta 2009.
- [2] W. Cheney and D. 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. J. Davis and P. 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] J. Stoer and R. Bulirsch. *Introduction to numerical analysis*. Springer, 2 edition, 1993.
- [8] C. W. Ueberhuber. *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997.
- [9] O. Zienkiewicz, R. Taylor, and J. Zhu. *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Butterworth-Heinemann, 6 edition, 2005.