

Ville Väänänen

Numeerinen integrointi: kvadratuureista kubatuureihin

Elektroniikan, tietoliikenteen ja automaation tiedekunta

Kandidaatintyö

Espoo 27. huhtikuuta 2010

Vastuupettaja:

TkT Markus Turunen

Työn ohjaaja:

TkT Simo Särkkä



Aalto-yliopisto
Teknillinen korkeakoulu

Tekijä: Ville Väänänen

Työn nimi: Numeerinen integrointi: kvadratuureista kubatuureihin

Päivämäärä: 27. huhtikuuta 2010

Kieli: Suomi

Sivumäärä: 4+28

Tutkinto-ohjelma: Bioinformaatioteknologia

Vastuuopettaja: TkT Markus Turunen

Ohjaaja: TkT Simo Särkkä

Tässä kandidaatintyössä kartoitetaan numeerisia integroimismenetelmiä, eli kvadratuureja, joita kutsutaan usean ulottuvuuden tapauksessa kubatuureiksi. Työssä esitetään erilaisia keinoja integraalien approksimointiin, rajoittuen interpolatorisiin kvadratuureihin ja kubatuureihin, jotka ovat tarkkoja tietyn asteluvun polynomeille.

Työn kokeellisessa osiossa vertaillaan neljää eri kubatuuria kaksiulotteisten integraalien ratkaisemiseksi. Interpolatoristen kubatuurien eduiksi esitetään vaadittavien funktioevaluaatioiden pientä määrää ja suurta tarkkuutta verrattuna kilpailuviin menetelmiin. Tällaisten integrointisääntöjen muodostaminen havaitaan kuitenkin ongelmalliseksi, mikä johtuu muun muassa moniulotteisten ortogonaalipolynomien monimutkaisuudesta ja puutteellisesta teoriasta.

Avainsanat: kvadratuuri, kubatuuri, gaussinen kvadratuuri, numeerinen integrointi, polynomiapproksimaatio

Esipuhe

Haluan kiittää ohjaajaani Simo Särkkää saamastani hyvästä ohjauksesta työn eri vaiheissa.

Espoo 27. huhtikuuta 2010

Ville Väänänen

Sisältö

Tiivistelmä	ii
Esipuhe	iii
Sisällysluettelo	iv
1 Johdanto	1
2 Riemannin integraali	3
2.1 Määritelmä	3
3 Kvadratuurit	4
3.1 Polynomiapproksimaatio	5
3.2 Newton–Cotes menetelmät	7
3.3 Gaussin kvadratuuri	8
3.3.1 Ortogonaalipolynomit	10
3.3.2 Ominaisuuksia	11
3.3.3 Laskeminen	12
4 Kubatuurit	14
4.1 Integroimisalueet	14
4.2 Tulosäännöt	15
4.3 Interpolatoriset kubatuurit	16
4.3.1 Moniulotteiset ortogonaalipolynomit	17
4.3.2 Symmetriasta	18
4.3.3 Alarajoista	18
4.4 Radonin 7 pisteinen kaava tasoalueille	19
5 Koeasetelma	21
6 Tulokset	23
7 Yhteenveto	24
Viitteet	26
A Liite	28

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 [27, 1].

Joillekin yksinkertaisille *integrandeille* $f(x)$ voidaan määrittää *integraalifunktio* $F(x)$, niin että se on ilmaistu algebrallisina lauseina sekä tunnettujen transkendenttien funktioiden avulla [21]. Tällöin integraali voidaan laskea helposti integraalifunktion saamien arvojen erotuksena. Valitettavasti integraalifunktion määrittäminen suljetussa muodossa ei aina onnistu yhden muuttujan integrandien tapauksessa ja se on vielä vaikeampaa jos muuttujia on enemmän.

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 [26]. Näin todennäköisesti onkin, mikäli ongelmallinen integraali on määritelty ainoastaan yhdessä ulottuvuudessa, jolloin myös usein 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

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

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. Toisin sanoen, annettua integraalia approksimoidaan integrandin evaluaatioiden lineaarikombinaationa. 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* [10, 11]. Kyseessä on elegantti integrointimenetelmä, jossa hyödynnetään *ortogonaalisiapolynomeja* 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 paperin, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvästä, jonka olette minulle suoneet”[26]

Valitettavasti integrointisääntöjen yleistäminen moneen ulottuvuuteen on ongelmallista. Kuitenkin Vuonna 1877 James Clerk Maxwell julkaisi 27-pisteisen, muotoa 1 olevan kubatuurin ja tätä pidetään ensimmäisenä varsinaisena esimerkkinä kubatuurista sellaisena, kuin se tässä työssä ymmärretään [3]. Tämän jälkeen ei juurikaan tapahtunut edistystä ennen vuotta 1948, jolloin Radon julkaisi sitä seuranneen tutkimuksen kannalta perustavanlaatuisen artikkelinsa [19]. Radonin artikkeli on ilmeisesti myös ensimmäinen, jossa sanaa “kubatuurisääntö” (saksaksi “Kubaturformel”) käytettiin viittaamaan kaavan (1) mukaisiin menetelmiin [8].

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 niiden keskiarvon avulla. Etuna on, että näin päästään, ainakin teoriassa, eroon niin sanotusta *dimensionaalisuuden kirouksesta*, jonka vuoksi useissa muissa integroimismenetelmissä tarvittavien funktio-evaluaatioiden määrä riippuu eksponentiaalisesti dimensioiden määrästä. Hyväksyttävään tarkkuuteen pääseminen vaatii kuitenkin suurta määrää satunnaispisteitä ja funktio-evaluaatioita jo yhdessä dimensiossa. Dimensioiden määrän lähestyessä useita satoja, mikä on mahdollista esimerkiksi joissain finanssimatematiikan sovelluksissa, ovat Monte Carlo -menetelmät usein ainoa vaihtoehto [14].

Tässä työssä käydään ensin läpi tarvittavat esitiedot, kuten Riemannin integraali ja polynomiapproksimaatio, 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. Lopuksi saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteella tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

2 Riemannin integraali

Integraalille on olemassa useita kehittäjiensä mukaan nimettyjä määritelmiä, joista Riemannin integraali lienee yksinkertaisin ja intuitiivisin. Usein kun puhutaan integraalista tarkoitetaan nimenomaan Riemannin integraalia, mikä pätee myös tähän työhön. Jos reaaliarvoinen funktio $f(x)$ on jatkuva (lukuunottamatta äärellistä määrää epäjatkuvuuspisteitä) ja rajoitettu integroimisalueessa $[a, b]$, on sille määritelty Riemannin integraali, jota merkitään $\int_a^b f(x) dx$ 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

Olkoon $f(x) \geq 0$ välillä $[a, b]$. Tällöin 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 Riemannin 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 Riemannin summaksi. Tarkastellaan Riemannin summien S_k muodostamaa sarjaa, jonka jaoille P_k pätee $\lim_{k \rightarrow \infty} |P_k| = 0$. Nyt jos mikä tahansa näin muodostettu Riemannin summien sarja suppenee, eli *konvergoituu, yhteiseen raja-arvoon* S , eli $\lim_{k \rightarrow \infty} S_k = S$, niin

$$\int_a^b f(x) dx = S \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Eräitä Riemannin summia intervallilla $[-2, 2]$, tarkemmin sanottuna ala- ja yläsummia, on havainnollistettu kuvassa 1 (jaon ei välttämättä tarvitse olla tasavälinen). Kuvasta 1 on helppo nähdä, että jaon tihentyessä Riemannin summat suppenevat samaan arvoon, joka vastaa kuvaajan $y = f(x)$ ja x -akselin rajaamaa pinta-alaa välillä $[-2, 2]$. [9]

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

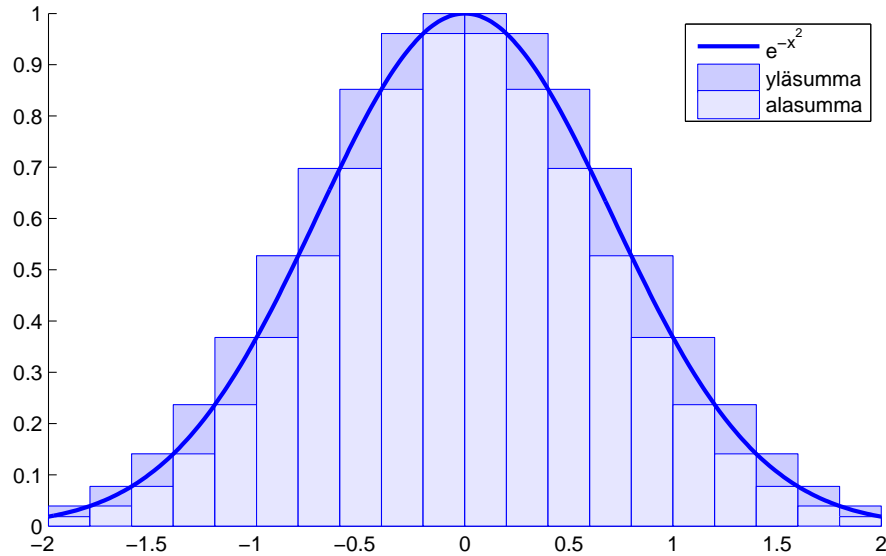
$$\int_a^\infty f(x) \, dx = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_a^r f(x) \, dx,$$

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

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 (1) voidaan päätellä, usein yksinkertaisen integraalin $\int_a^b f(x) \, dx$ sijaan käsitellään *painotettuja* integraaleja $\int_a^b f(x)w(x) \, dx$. Jos integroimissääntö $Q[f]$ on määritelty jonkin painofunktion $w(x)$ suhteen, on painofunktio “lukittu” ja ainoastaan funktiota $f(x)$ varioidaan. Tässä työssä $w(x)$ oletetaan aina ei-negatiiviseksi ja rajoitetuksi integromisalueessa. 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 $f(x)$:n painotettu keskiarvo välillä $[a, b]$.



Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

3 Kvadratuurit

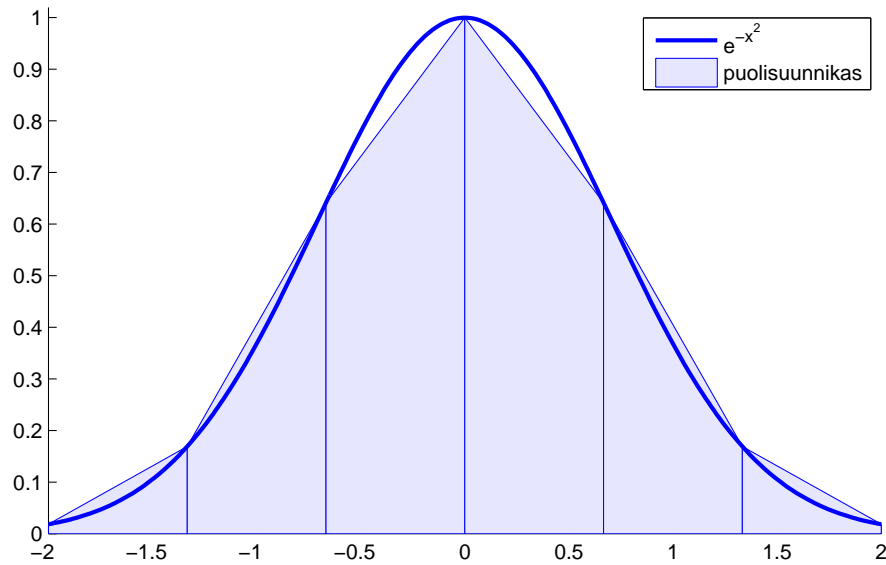
Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakaide-menetelmä* [26]. Jos tasavälistä alasummaa (valitaan jokaiselta väliltä integrandin

pienin arvo) merkitään nyt L ja vastaavasti yläsummaa (valitaan jokaiselta väliltä integrandin suurin arvo) U , niin kuvan 1 esittämässä tapauksessa saadaan $L[e^{-x^2}] \approx 1.57$ ja $U[e^{-x^2}] \approx 1.96$, 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 $P_n = \{x_i \mid x_i = a + hi, i = 0, \dots, n\}$, 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.[11]



Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

Sekä suorakulmiomenetelmä, että puolisuunnikasmenetelmä voidaan tulkita siten, että integrandia approksimoidaan jokaisella välillä vakiofunktiolla (0:nneen asteen polynomi) tai vastaavasti ensimmäisen asteen polynomilla. Tällaisen tulkinnan siivittämänä näille menetelmille löytyy ilmeinen parannusehdote: käytetään approksimointiin korkeamman asteen polynomia.[11]

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

$$\|f - \hat{\varphi}\| \leq \|f - \varphi\| \quad \forall \varphi \in \Phi. [11] \quad (5)$$

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

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

jolloin puhutaan *pienimmän neliösumman* menetelmästä. Diskreetissä tapauksessa

$$\|f(x)\|_{2,w} = \sqrt{\sum_{i=1}^N w_i |f(x_i)|^2}. \quad (7)$$

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 . [11]

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 [9]. 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 [9, 11]. Toisin sanoen, jos kaavassa (5) korvataan $\hat{\varphi}$ n -asteisella polynomilla \hat{p}_n ja f on jatkuva äärellisellä approksimointivälillä, niin

$$n \rightarrow \infty \implies \|f - \hat{p}_n\| \rightarrow 0. \quad (8)$$

Konvergenssin nopeus riippuu f :n *sileydestä*, eli sen jatkuvien derivaattojen $f', f'', \dots, f^{(k)}$ lukumäärästä [24, s. 74]. Jos funktiolla on ääretön määrä jatkuvia derivaattoja, kuten esimerkiksi funktiolla $f(x) = e^x$, sitä kutsutaan *sileäksi*.

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 $\{f(x_i)\} \subset R$ niitä vastaavat mielivaltaiset arvot. Osoittautuu, että p on aina muodostettavissa siten, että $m \leq n$ ja se on tällöin ainutkertainen. [2, s. 128]

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

$$\begin{aligned} \ell_i(x) &= \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \\ \implies \ell_i(x_j) &= \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}. \end{aligned}$$

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*) [9]. Seuraavassa keskitytään tilanteeseen, jossa sääntöä käytetään vain kerran. Muistetaan kuitenkin, että interpolatorisen säännön tarkkuutta voidaan aina parantaa käyttämällä sitä paloittain.

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 määritettyä interpoloivaa polynomia p , saadaan

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &= \int_a^b p(x) \, dx + E_n[p] = \int_a^b \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i) \, dx + E_n[p] \\ &= \sum_{i=0}^n \left(f(x_i) \int_a^b \ell_i(x) \, dx \right) + E_n[p] \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_{k+i}) w_i + E_n[p] \end{aligned} \quad (9)$$

$$w_i = \int_a^b \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^n \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \, dx. \quad (10)$$

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. [11]

Havaitaan, että mikäli kaavassa (9) valitaan $n = 1$, ja sovelletaan sitä paloittain, saadaan edellä esitelty puolisuunnikasmenetelmä (4). Jos taas valitaan $n = 2$, eli interpolaatioon käytetään kolmea pistettä, saadaan laajalti käytetty *Simpsonin* menetelmä:

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \frac{h}{3} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) [11]. \quad (11)$$

Virheen $E_n[p]$ pienentämiseksi voidaan nähdä kaksi eri lähestymistapaa: joko käytetään pienen n :n Newton–Cotes kaavaa paloittain aina vain lyhyemmillä osaväleillä

tai käytetään pidempiä osavälejä mutta kasvatetaan 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 jatkuvilla integrandeille. Toisessa tapauksessa n :n kasvaessa suureksi, voivat painot w_i olla joko positiivisia tai negatiivisia ja absoluuttiselta arvoltaan mielivaltaisen suuria, jolloin nämä menetelmät eivät enää ole numeerisessa mielessä stabiileja. Tämän vuoksi korkean tarkkuusasteen Newton–Cotes menetelmiä ei juurikaan käytetä.[13]

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 tarkkuusastetta mahdollista parantaa interpolatorista paremmaksi? Osoittautuu, että jos solmupisteet x_i ovat ennalta määrätty, on interpolatorinen tarkkuusaste paras mahdollinen, mutta jos solmupisteet saadaan valita vapaasti, voidaan tarkkuusastetta kasvattaa.

3.3 Gaussin kvadratuuri

Tarkastellaan nyt kaavan (1) mukaista integroimissääntöä yhdessä ulottuvuudessa

$$\int_a^b f(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n f(x_i)w_i + E_n[f]. \quad (12)$$

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

$$w_i = \int_a^b w(x)\ell_i(x) \, dx \quad (13)$$

Väli (a, b) voi olla ääretön, kunhan kaavan (12) integraali on määritelty ainakin jos $f(x)$ on polynomi. Integroinnin lineaarisuudesta johtuen, riittää että integraali on määritelty kaikille monomeille, eli että painofunktion kaikki *momentit* μ_s

$$\mu_s = \int_a^b x^s \, dx, \forall s \in \mathbb{N}_0 \quad (14)$$

ovat määritellyt [11]. Newton–Cotes kaavojen perusteella tiedetään, että mikäli on annettu mitkä tahansa n pistettä, niin voidaan määrittää kaava (12), jonka tarkkuusaste on $d = n - 1$. Voidaan kuitenkin osoittaa, että muotoa (12) olevan kvadratuurin maksimaalinen tarkkuusaste on $d = 2n - 1$, mikäli jokainen n :stä solmusta saadaan valita vapaasti [11].

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

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

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 (12) mukaisen kvadratuurin, jonka painot on laskettu kaavan (13) mukaisesti, 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 (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 $2n$ [13].

3.3.1 Ortogonaalipolynomit

Keskitytään nyt tarkastelemaan ehtoa (16). Sanotaan, että f ja g ovat *ortogonaaliset* w :n suhteen välillä $[a, b]$, jos

$$\int_a^b f(x)g(x)w(x) \, dx = 0, \quad (20)$$

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 (15) nähdään selvästi, 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 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 [11, 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 ortogonaalipolynomit 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 [25].

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

$$\begin{aligned} \pi_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k)\pi_k(x) - \beta_k\pi_{k-1}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \\ \pi_0(x) &= 1, \quad \pi_{-1}(x) = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

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

Rekursiokaavasta (21) päästään suoraan tulokseen, jonka perusteella solmut x_i ja painot w_i saadaan laskettua tietyn Jacobin–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.[25]

Taulukko 1: Klassiset ortogonaalipolynomit

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

3.3.2 Ominaisuuksia

Gaussin kvadratuurisääntö on optimaalinen kaavan (12) 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 $[a, b]$
2. kaikki painot w_i ovat positiivisia, koska

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

joka tarkoittaa että Gaussin kvadratuuri on numeerisesti stabiili

3. jos integrandi on jatkuva ja integroimisväli on äärellinen, niin $E_n[f] \rightarrow 0$, kun $n \rightarrow \infty$.

Painojen w_i positiivisuus on tärkeä ominaisuus kaikkien muotoa (12) olevien kvadratuurien konvergenssin kannalta, sillä voidaan osoittaa, että tässä tapauksessa kaikille integroimisvälillä jatkuville integrandeille f , ääretön-normin kannalta parhaalle maksimissaan n -asteiselle polynomiapproksimaatiolle $\hat{p}_n(x)$ ja kaikille $n > 0$ pätee

$$\left| \int_a^b f(x) w(x) dx - \sum_{i=1}^n f(x_i) w_i \right| < 4 \|f(x) - \hat{p}_n(x)\|_\infty. \quad (22)$$

Kaava (22) tarkoittaa siis, että mikäli kvadratuurin painot ovat positiiviset, niin kvadratuurin konvergenssi on nopea, jos parhaan polynomiapproksimaation konvergenssi on nopea [24]. Gaussin kvadratuurien tapauksessa kaavassa (22) voidaan $\hat{p}_n(x)$ korvata $\hat{p}_{2n+1}(x)$:llä.

Kaavan (22) ja polynomiapproksimoinnin teorian avulla voidaan Gaussin kvadratuureille johtaa virhearvio [24]. Olkoon $\|f\|_T = \left\| \frac{f'(x)}{\sqrt{1-x^2}} \right\|_1$. Olkoon f jatkuva integroimisvälillä $[-1, 1]$, olkoon sillä jatkuvat $k-1$ derivaattaa jollakin $k \geq 1$ ja olkoon $\|f^{(k)}\|_T < \infty$. Tällöin Gaussin kvadratuurin virheelle pätee kaikilla $n \geq \frac{k}{2}$

$$|E_n[f]| \leq \frac{32 \|f^{(k)}\|_T}{15\pi k(2n+1-k)^k}. \quad (23)$$

Numeerisessa integroinnissa syntyvän virheen arvioiminen on välttämätöntä, jos halutaan pystyä varmistumaan saadun tuloksen laadusta. Lisäksi, jos numeeriselle integroimismenetelmälle on olemassa virhearvio, sen konvergenssia voidaan yleensä nopeuttaa tämän arvion avulla. Esimerkkinä tästä on *Romberg*-kvadratuuri, jossa paloittaisen puolisuunnikassäännön konvergenssia nopeutetaan Richardson-ekstrapolaation avulla [2, s. 204].

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 $w(x) = 1$ 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 $\omega_3 \in \mathbb{P}_3$:n täytyy olla ortogonaalinen kaikkia $p(x) \in \mathbb{P}_2$ kohtaan. Sisätulon (20) lineaarisuudesta johtuen näin on, mikäli ω_3 on ortogonaalinen kannan $\{1, x, x^2\}$ jokaisen monomin kanssa, joten saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{cases} 0 = \int_{-1}^1 x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 dx \\ 0 = \int_{-1}^1 x(x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0) dx \\ 0 = \int_{-1}^1 x^2(x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0) dx \end{cases},$$

jonka ratkaisu on $a_0 = a_2 = 0$ ja $a_1 = -\frac{3}{5}$, jolloin $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$.

Vaihtoehtoisesti olisimme voineet käyttää hyväksi tietoa, että $\omega_3 = \frac{1}{l_3} P_3$, missä P_3 on kolmas Legendren ortogonaalipolynomi ja l_3 on P_3 :n kolmannen asteen termin kerroin. Kaavasta (16) nähdään, että jos $\langle f, g \rangle = 0$ ja $c \in \mathbb{R}$, niin myös $\langle cf, g \rangle = 0$, eli ortogonaalipolynomi on määrätty skalaarikerrointa vaille. Legendren polynomit

on standardoitu siten, että $P_n(1) = 1$, kun taas solmupolynomin korkeimman asteen termin kerroin on aina 1. Tästä johtuen on $\omega_n = \frac{1}{l_n} P_n$. Legendren polynomien rekursiokaava on

$$(n+1)P_{n+1} = (2n+1)xP_n - nP_{n-1}, \quad P_0 = 1, \quad P_1 = x, \quad (24)$$

josta saadaan

$$\begin{aligned} P_2 &= \frac{3}{2}x^2 - \frac{3}{2} \\ P_3 &= \frac{5}{3}xP_2 - \frac{2}{3}P_1 = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x \\ \frac{2}{5}P_3 &= x^3 - \frac{3}{5}x = \omega_3, \end{aligned}$$

kuten pitikin [9, s.27].

Painot w_i voitaisiin laskea kaavasta (13), 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

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

Muuttujanvaihdoksen $t = x+1$ 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

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

Vastaavasti käyttämällä Simpsonin menetelmää (11) samassa tilanteessa, saadaan virheeksi

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

joka on yli 16 kertaa suurempi kuin Gaussin kvadratuurin virhe.

Käytännössä Gaussin kvadratuurin laskemisessa hyödynnetään jo aiemmin mainittua mahdollisuutta muuntaa ongelma tridiagonaalisen matriisin ominaisarvojen ja -vektoreiden selvittämiseksi. Tämä on mahdollista tehdä algoritmisessa suoritusajassa $O(n^2)$ [24]. Trefethen esittää artikkelissaan [24] seitsemän rivisen MATLAB-funktion, joka laskee Gaussin kvadratuurin valitulla mielivaltaisella tarkkuusteella (vakiopainofunktiolle). Tähän perustuva kaksiulotteinen tulosääntö on esitetty liitteessä A.

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 affiinimuunnoksella. Useammassa ulottuvuudessa erilaisia integroimisalueita (joita ei voi muuntaa toisikseen affiinimuunnoksella) on ääretön määrä. Toiseksi, yhdessä ulottuvuudessa ortogonaalipolynomien teoria on hyvin tunnettu ja siitä on huomattavaa apua kvadratuurien määrittämisessä. Usean muuttujan tapauksessa tilanne on kuitenkin toinen, sillä moniulotteisten ortogonaalipolynomien teoria on huomattavasti monimutkaisempi ja heikommin tunnettu, eikä sen avulla ole onnistuttu muodostamaan kubatuurisääntöjä kuin harvoissa tapauksissa. [23, 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 $n:n$ muuttujan polynomi $p(\mathbf{x}) \in \mathbb{P}_d^n$ on monomien \mathbf{x}^α äärellinen lineaarikombinaatio

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} a_\alpha \mathbf{x}^\alpha \quad (25)$$

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

$$\text{Deg}[p] = d = \max \left\{ \sum_{i=1}^n |\alpha_i| \mid a_\alpha \neq 0 \right\}. \quad (26)$$

Kuten aiemminkin, sanotaan että kubatuurisäännön tarkkuusaste on d jos se on tarkka kaikille polynomeille astetta d , mutta ei ainakaan yhdelle astetta $d+1$. Määritellään lisäksi polynomin p *yleinen asteluku*

$$\hat{\text{Deg}}[p] = \max \left\{ \max \left\{ |\alpha_i| \mid i = 1, \dots, n \right\} \mid a_\alpha \neq 0 \right\} \quad (27)$$

ja sanotaan että kubatuurisäännön yleinen tarkkuusaste on b jos se on tarkka kaikille polynomeille yleistä astetta b , mutta ei ainakaan yhdelle yleistä astetta $b+1$. Esimerkiksi polynomille $p(x, y) = x^3y^4 + y^5$ pätee $\text{Deg}[p(x, y)] = \max\{3+4, 5+0\} = 7$ ja $\hat{\text{Deg}}[p(x, y)] = \max\{\max\{3, 4\}, \max\{5, 0\}\} = \max\{4, 5\} = 5$. Tämä tarkoittaa myös, että jos $\mathbb{P}_1 = \{p \mid \text{Deg}[p] \leq d\}$ ja $\mathbb{P}_2 = \{p \mid \hat{\text{Deg}}[p] \leq d\}$, niin $\mathbb{P}_1 \subset \mathbb{P}_2$.

4.1 Integroimisalueet

Kubatuurisäännöt on määritelty koskemaan tiettyä pintaa tai tilavuutta $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Yleisimmin käytetyille alueille on omat merkintänsä [23, s.219] ja alueet joita tässä työssä käsitellään esitelty taulukossa 2. Äärettömän suurille alueille myös painofunktion ajatellaan olevan osa alueen määritelmää, joten näissä tapauksissa taulukossa 2 on ilmoitettu myös painofunktio. Mielivaltaiselle integroimisalueelle joudutaan joko kehittämään täysin oma kubatuurinsa tai se voidaan yrittää ositella ali-alueisiin, joille kubatuurisäännöt tunnetaan, jonka jälkeen alkuperäistä integraalia voidaan approksimoida ali-alueiden integraalien summana [23, s.14].

Taulukko 2: Yleisimmät integroimisalueet

Merkintä	Nimi	Määritelmä	$w(\mathbf{x})$
C_n	n -kuutio	$-1 \leq x_i \leq 1$	
S_n	n -pallo	$\mathbf{x}^T \mathbf{x} \leq 1$	
U_n	n -pallon pinta	$\mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$	
T_n	n -simpleksi	$x_1 + \dots + x_n \leq 1$	
$E_n^{r^2}$	n -avaruus	$-\infty < x_i < \infty$	$e^{-\mathbf{x}^T \mathbf{x}}$
E_n^r	n -avaruus	$-\infty < x_i < \infty$	$e^{-\sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}}$

4.2 Tulosäännöt

Tulosäännöissä ideana on muodostaa kubatuurisääntö ulottuvuudessa $n = r + s$ r -ulotteisen ja s -ulotteisen kubatuurisäännön tulona. Oletetaan, että integroimisalue $\Omega_r \times \Omega_s \subset \mathbb{R}^n$ on integroimisalueiden $\Omega_r \subset \mathbb{R}^r$ ja $\Omega_s \subset \mathbb{R}^s$ *karteellinen tulo*, eli

$$\Omega_r \times \Omega_s = \{(x_1, \dots, x_n) \mid (x_1, \dots, x_r) \in \Omega_r, (x_{r+1}, \dots, x_n) \in \Omega_s\}.$$

Olkoot $\mathbf{x}_r = (x_1, \dots, x_r)$, $\mathbf{x}_s = (x_{r+1}, \dots, x_n)$ ja $\mathbf{x}_n = (x_1, \dots, x_n)$. Oletetaan lisäksi, että $w(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_s) = w_r(\mathbf{x}_r)w_s(\mathbf{x}_s)$ ja olkoot annettuna kubatuurisäännöt

$$\int_{\Omega_r} w_r(\mathbf{x}_r) f(\mathbf{x}_r) d\mathbf{x}_r \approx \sum_{i=1}^{N_r} w_{r,i} f(\mathbf{x}_{r,i}),$$

jonka tarkkuusaste on d_r sekä

$$\int_{\Omega_s} w_s(\mathbf{x}_s) f(\mathbf{x}_s) d\mathbf{x}_s \approx \sum_{j=1}^{N_s} w_{s,j} f(\mathbf{x}_{s,j}),$$

jonka tarkkuusaste on d_s . Näiden avulla voidaan muodostaa $N_r N_s$ pisteinen tulosääntö

$$\iint_{\Omega_r \times \Omega_s} w(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_s) f(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_s) d\mathbf{x}_r d\mathbf{x}_s \approx \sum_{\substack{i=1 \\ j=1}}^{N_r N_s} w_{s,j} w_{r,i} f(\mathbf{x}_{r,i}, \mathbf{x}_{s,j}) \quad (28)$$

ja sen *yleinen* tarkkuusaste d on $\min\{d_r, d_s\}$ [9].

Tulosääntöjä voidaan muodostaa tarpeeksi säännöllisille integroimisalueille, kuten C_n tai T_n . Lisäksi painofunktion on oltava jaettavissa tekijöihinsä kuten edellä esitettiin. Mikäli tulosääntö on mahdollista muodostaa, on sen löytäminen helppoa ja virhearviokin on saatavilla. Kuitenkin, jos tarkastellaan esimerkiksi p -pisteistä kvadratuuria välillä $[0, 1]$, jonka avulla muodostetaan tulosääntö n -kuutiolle, saadaan pisteiden määräksi p^n , joka kasvaa äkkiä epäkäytännöllisen suureksi. Tarvitaan siis parempia ratkaisuja.

4.3 Interpolatoriset kubatuurit

Interpolatoriset kvadratuurisäännöt voitiin muodostaa helposti integroimalla interpolaatiopolynomia, joka on aina olemassa. Interpolaatiopolynomille ei valitettavasti ole olemassa suoraa yleistystä useammassa ulottuvuudessa, toisin sanoen, jos on annettu mielivaltaiset pisteet $\{\mathbf{x}_i \mid i = 1, \dots, N, \mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n\}$ ja niitä vastaavat arvot $\{y_i \mid i = 1, \dots, N, y_i \in \mathbb{R}\}$, ei välttämättä voida muodostaa polynomia $p(\mathbf{x})$ jolle pätsi $p(\mathbf{x}_i) = y_i \forall i$ [9, s.275].

Yksiulotteisessa tapauksessa huomasimme, että kvadratuuri, joka muodostetaan integroimalla interpoloivaa polynomia, on sama kuin se, joka saadaan jos vaaditaan että integraalin on oltava tarkka valitun polynomiavaruuden \mathbb{P}_d^1 kannalle. Tämä idea voidaan yleistää myös moniulotteiseen tapaukseen. Vaaditaan siis nyt, että kubatuurin on oltava tarkka kaikille $\{f_i\}$, $\text{span}\{f_i\} = \mathbb{P}_d^n$. Saadaan epälineaarinen yhtälöryhmä

$$\sum_{k=1}^N w_k f_i(\mathbf{x}_k) = \int_{\Omega} f_i(\mathbf{x}) w(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad i = 1, \dots, \dim[\mathbb{P}_d^n] = \binom{n+d}{d}, \quad (29)$$

jossa f_i :t muodostavat \mathbb{P}_d^n :n kannan, ja jos pisteet x_i on annettu (tai päätetty), muuttujina ovat $N = \binom{n+d}{d}$ painoa w_k . Nyt jos painot w_k määräytyvät yksiselitteisesti pisteiden x_i perusteella, kutsutaan näin saatua kubatuuria *interpolatoriseksi*. Jos f_i :t ovat monomeja, voidaan yhtälöiden (29) oikealle puolelle laskea numeroarvot (painofunktion kaikkien momenttien tuli olla määritetty). Tarkastellaan esimerkiksi, jossa halutaan muodostaa kubatuuri, joka on tarkka kaikille $p(x, y) \in \mathbb{P}_2^2$ alueessa C_2 . Tällöin monomikanta on $\{1, x, y, xy, x^2, y^2\}$ ja kaavan (29) mukaiseksi systeemiksi saadaan

$$\begin{aligned} w_1 + \dots + w_6 &= 4 \\ w_1 x_1 + \dots + w_6 x_6 &= 0 \\ w_1 y_1 + \dots + w_6 y_6 &= 0 \\ w_1 x_1 y_1 + \dots + w_6 x_6 y_6 &= 0 \\ w_1 x_1^2 + \dots + w_6 x_6^2 &= \frac{4}{3} \\ w_1 y_1^2 + \dots + w_6 y_6^2 &= \frac{4}{3}. \end{aligned} \quad (30)$$

Jos pisteet (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, 6$ tiedetään, (29) on lineaarinen kuuden yhtälön yhtälöryhmä, jossa muuttujina ovat painot $\{w_1, \dots, w_6\}$. Jos myös pisteitä pidetään muuttujina, on kyseessä epälineaarinen yhtälöryhmä kahdeksantoista muuttujan $\{x_1, \dots, x_6, y_1, \dots, y_6, w_1, \dots, w_6\}$ suhteen.

Yleisesti ottaen, jokainen piste \mathbf{x}_k tuo yhtälöryhmään $n + 1$ muuttujaa: koordinaatit $x_{1,k}, \dots, x_{n,k}$ ja painon w_k , joten N -pisteisen kubatuurin yhtälöryhmässä on $N(n + 1)$ muuttujaa.

Kubatuurisääntöjen olemassaolosta voidaan osoittaa muun muassa seuraavaa: aina voidaan valita $N = \dim[\mathbb{P}_d^n]$ pistettä \mathbf{x}_i siten, että yhtälöryhmä (29), ja sitä kautta painot w_i , on ratkaistavissa [23, s. 54]. Nämä säännöt ovat analogisia yhden ulottuvuuden Newton–Cotes säännöille [23, s. 54]. Voidaan itse asiassa osoittaa vielä paljon enemmänkin. Niin sanotun Tchakaloffin teoreeman mukaan jos $N \leq \dim[\mathbb{P}_d^n]$

ja $w(\mathbf{x}) > 0 \forall \mathbf{x} \in \Omega$, niin yhtälöryhmä (29) ei ole ainoastaan ratkaistavissa, vaan vieläpä siten että kaikki painot ovat positiivisia ja kaikki pisteet ovat integrointialueen Ω sisällä [3, s. 26]. Tchakaloffin teoreeman ylärajan $N = \dim[\mathbb{P}_d^n]$ voidaan osoittaa olevan pienin yleispätevä yläraja, sillä on mahdollista konstruoida n -ulotteinen integroimisalue, jolle ei ole olemassa kubatuurisääntöä jossa olisi tätä vähemmän pisteitä [3, s. 26].

Yksiulotteisessa interpolatorisessa tapauksessa havaittiin, että valitsemalla pisteet tiettyjen ortogonaalisten polynomien nollakohdiksi, voitiin vaadittavien pisteiden määrää pienentää. Päästiin myös selkeään lopputulokseen: säilyttääkseen tarkkuusasteen m , kvadratuurin painoista voitiin ”hävittää” maksimissaan puolet ja saatiin Gaussin kvadratuuri. Kuinka siis pisteet $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ tulisi valita, jotta N olisi pienempi kuin $\dim[\mathbb{P}_d^n]$? Tästä päästään monen muuttujan ortogonaalisiin polynomeihin.

4.3.1 Moniulotteiset ortogonaalipolynomit

Ensinnäkin, jokaista astelukua d kohti on olemassa useampia moniulotteisia ortogonaalipolynomeja. Yleensä ne normalisoidaan siten, että asteluvultaan d olevia termejä on vain yksi ja sen kerroin on 1. Gaussin kvadratuurien yleistystä koskee seuraava Mysovskikhin teoreema: välttämätön ehto sellaisen $N = \dim[\mathbb{P}_k^n]$ pisteisen kubatuurisäännön olemassaololle, jonka tarkkuusaste on $d = 2k + 1$, on se että normalisoiduilla n -ulotteisilla ja $k + 1$ asteisilla ortogonaalisilla polynomeilla on N yhteistä nollakohtaa. Valitettavasti tiedetään, että tämä ehto ei täyty esimerkiksi silloin, kun integroimisalueena on neliö tai kolmio ja painofunktio on vakio.[4, s. 5].

Tarkastellaan kaikkien sellaisten ortogonaalisten polynomien joukkoa, jotka ”häviävät” (eli joilla on yhteiset nollakohdat) annetussa pistejoukossa. Selvästikin tällaisten polynomien joukko on enemmän kuin pelkästään vektoriavaruus. Sitä kutsutaankin *polynomiseksi ideaaliksi*. Ideaaliteorian avulla voidaan todistaa useita kubatuureja koskevia teoreemoja, kuten esimerkiksi aiemmin mainittu Tchakaloffin teoreema sekä edellä mainittu Mysovskikhin teoreema [3]. Polynomisten ideaalien ja kubatuurien välinen yhteys voidaan muotoilla seuraavasti: olkoon I n -ulotteinen integraali, $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \mathbb{C}^n$ ja $U := \{p \in \mathbb{P}^n \mid p(\mathbf{x}_i) = 0 \forall \mathbf{x}_i\}$. Tällöin seuraavat lauseet ovat yhtenevät:

- $p \in U \cap \mathbb{P}_d^n \implies I[p] = 0$
- on olemassa kubatuurisääntö Q , jolle pätee $I[p] = Q[p] \forall p \in \mathbb{P}_d^n$ ja jonka pisteiden määrä on maksimissaan $N = \dim[\mathbb{P}_d^n] - \dim[U \cap \mathbb{P}_d^n]$

Ideaaliteoriaan perustuen on mahdollista muodostaa joitakin kubatuureja myös käytännössä. Tällöin ongelmaksi tulee polynomi-ideaalin kannan löytäminen [3, s. 39]. Lisätietoa ideaaliteoriasta ja kubatuureista löytyy esimerkiksi lähteistä [3, kpl. 6.3 ja 9] ja [20].

4.3.2 Symmetriasta

Hyödyntämällä Sobolevin *invarianttiteoriaa* [3, s. 17], voidaan yhtälöryhmän (29) yhtälöiden määrää joissakin tapauksissa radikaalisti pienentää. Tämä tarkoittaa käytännössä sitä, että etsittävälle kubatuurisäännölle määrätään tietty rakenne, joka perustuu integroimisalueen ja painofunktion symmetriaan. Arasatnamin *et al.* [1, s. 5] esimerkkiä mukaillen tarkastellaan kubatuurisääntöä, jossa $n = 20$ ja $d = 3$. Tällöin yhtälöryhmässä (29) on $\frac{23!}{20!3!} = 1771$ yhtälöä. Mutta mikäli rajoitutaan tarkastelemaan *täysin symmetristä* kubatuurisääntöä, saadaan $N = 2n = 40$ pisteinen kubatuurisääntö ratkaistuksi ainoastaan *kahden* yhtälön avulla.

Olkoon X kubatuurisäännön Q tukipisteiden joukko. Q :n sanotaan olevan täysin symmetrinen, jos pätee

$$\mathbf{a} = (a_1, \dots, a_n) \in X \implies \mathbf{b} = (s_1 a_{p_1}, \dots, s_n a_{p_n}) \in X,$$

jossa $s_i \in \{-1, 1\}$ ja $\{p_1, \dots, p_n\}$ on mikä tahansa indeksien $1, \dots, n$ permutaatio [1, 3]. Lisäksi kaikilla näin saaduilla pisteillä \mathbf{a} ja \mathbf{b} on oltava samat painot. Kubatuuria sanotaan *keskipisteensä suhteen symmetriseksi* jos pätee

$$Q[\mathbf{x}^\alpha] = 0 \quad \forall \alpha \in \mathbb{N}_0^n, \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i = \text{pariton} \quad [15].$$

On olennaista huomata, että ratkaisun helpottumista lukuunottamatta ei ole mitään erityistä syytä miksi kubatuurisäännön symmetrian pitäisi olla sama kuin integroimisalueen tai painofunktion. Päinvastoin, pakottamalla kubatuurisääntö noudattamaan tiettyä rakennetta voidaan estyä löytämästä sääntöä, jonka pistemäärä on pienin mahdollinen. Hyvä esimerkki tästä on tarkkuusastetta 9 oleva sääntö nelilölle (C_2). Tällöin täysin symmetrisessä säännössä on 20 pistettä, mutta *minimisäännössä*, joka on invariantti rotaation suhteen, on 17 [3].

4.3.3 Alarajoista

Erittäin olennaista kubatuurisääntöjen löytämiselle on arvio pienimmälle mahdolliselle tukipisteiden määrälle N . Jotta yhtälöryhmää (29) voitaisiin lähteä ratkaistamaan, olisi N :lle saatava jokin arvio, mieluiten tietysti pienin mahdollinen [3, s. 27]. Myös edellä esitellyn polynomisen ideaalin kannan löytäminen on vahvasti riippuvainen N :stä [8, s. 141], jopa siinä määrin että Coolsin mielestä kubatuurisääntöjen ja ortogonaalisten polynomien tutkiminen ei kannata ennen kuin alarajoista osataan sanoa enemmän [4, s. 2].

Polynomisten ideaalien ja kubatuurien välisestä yhteydestä on vain pieni matka erääseen hyvin yleiseen alarajaan. Tarkastellaan ensin \mathbb{P}_k^n :n dimensiota, jos rajoitutaan pelkästään tietylle integroimisalueelle Ω . Jos alue on esimerkiksi n -pallon pinta $\Omega = \{\mathbf{x} \mid \sum_{i=1}^n x_i^2 = 1\}$, niin kaikki $(\sum_{i=1}^n x_i^2 = 1)^p$, $p \in \mathbb{N}$ ovat yhteneväisiä vakiopolynomin 1 kanssa ja merkitään

$$\dim[\mathbb{P}_{k|\Omega}^n] = \binom{n+d}{n} - \binom{n+d-2}{n}.$$

Nyt jos kubatuuri on tarkka kaikille \mathbb{P}_{2k}^n , niin saadaan alaraja

$$N \geq \dim[\mathbb{P}_{k|\Omega}^n]. \quad (31)$$

Kaavan (31) ongelma on, että useimmissa tapauksissa sitä ei ole mahdollista saavuttaa. Ne harvat tapaukset joissa tämä alaraja on saavutettu on listattu lähteessä [3, s. 29]. Yhtä tapausta lukuunottamatta niiden kaikkien tarkkuusaste on parillinen. Tämä ei ole yllättävää, sillä kaavan (31) alaraja on sama tarkkuusasteille $d = 2k$ ja $d = 2k + 1$.

Toinen yleinen alaraja koskee keskipisteensä suhteen symmetrisiä kubatuureja. Niiden tarkkuusaste on pariton ja niitä koskevan alarajan osoitti yleisesti Möller [17]. Olkoon keskipisteensä suhteen symmetrisen kubatuurisäännön tarkkuusaste $d = 2s + 1$, $s \in \mathbb{N}_0$ ja olkoon R_{2k}^n polynomiavaruus, johon kuuluu kaikki tarkkuusasteen $2k$ parilliset polynomit ja R_{2k+1}^n polynomiavaruus, johon kuuluu kaikki tarkkuusasteen $2k + 1$ parittomat polynomit. Tällöin pisteiden määrälle N pätee

$$N \geq 2 \dim[R_{s-1}^n] - \begin{cases} 1 & \text{jos } s \text{ on parillinen,} \\ 0 & \text{jos } s \text{ on pariton.} \end{cases} \quad (32)$$

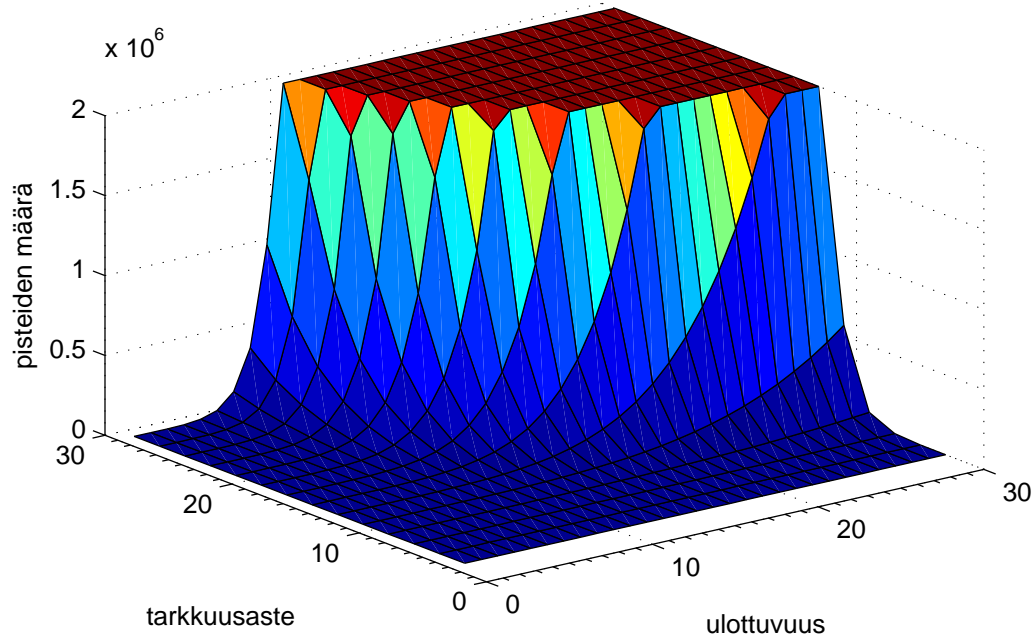
Ilmaistuna eksplisiittisemmin kaavasta (32) saadaan:

$$N \geq \binom{n+s-1}{n} + \begin{cases} \sum_{k=1}^{n-1} 2^{k-n} \binom{k+s-1}{k} & \text{jos } s \text{ on parillinen,} \\ \sum_{k=1}^{n-1} (1 - 2^{k-n}) \binom{k+s-2}{k} & \text{jos } s \text{ on pariton [15].} \end{cases} \quad (33)$$

Möllerin alarajaa on havainnollistettu kuvassa 3, jossa alarajan mukainen pistemäärä on kuvattu ulottuvuuden n ja tarkkuusasteen $d = 2s - 1$ funktiona. Kuten kuvasta 3 nähdään, lähtee vaadittavien pisteiden määrä jyrkkään nousuun suurin piirtein kun tarkkuusaste ja ulottuvuuksien määrä on ylittänyt kymmenen. Jos tarkkuusaste pidetään melko matalana, niin pisteiden määrä ei kasva liian suureksi edes suurilla n :än arvoilla. Esimerkiksi kun $n = 100$, saadaan pisteiden vähimmäismääräksi tarkkuusasteilla $d = 5$ ja $d = 7$ vastaavasti $N = 10101$ ja $N = 343600$. Hinrichs *et al* ovat vastikään johtaneet kubatuurit, jotka saavuttavat näissä tilanteissa arvot $N = 10701$ ja $N = 404001$ (integroimisalueena n -kuutio ja vaatimuksena symmetrinen tulomuotoinen painofunktio) [12]. Nämä ovat jo hyvin lähellä minimiä. Möllerin alarajan perusteella voidaan joka tapauksessa päätellä, että suuren dimension ja tarkkuusasteen ongelmissa ratkaisua täytyy etsiä muualta kuin interpolatorisista kubatuureista.

4.4 Radonin 7 pisteen kaava tasoalueille

Seuraavaksi käydään läpi eräs klassinen esimerkki kubatuurisäännöstä, jonka johtamisessa on hyödynnetty moniulotteisia ortogonaalisia polynomeja. Tuloksena saatava sääntö sisältää lisäksi todistettavasti pienimmän mahdollisen määrän tukipisteitä kyseiselle tarkkuusasteelle, mikäli integroimisalue täyttää erään myöhemmin näytettävän ehdon [8, s. 133].



Kuva 3: Möllerin alaraja keskipisteensä suhteen symmetrisille kubatuureille ulottuvuuden ja tarkkuusasteen funktiona

Oletetaan siis nyt, että ollaan etsimässä approksimaatiota kaksiulotteiselle integraalille I . Ensinnäkin, kahdessa ulottuvuudessa voidaan muodostaa neljä normalisoitua kolmannen asteen ortogonaalista polynomia. Merkitään P^3 :lla normalisoitua polynomia jonka asteluku on täsmälleen 3 ja Q :lla kaikkia kaksiulotteisia polynomeja joiden asteluku ≤ 2 . Tällöin saadaan kolmannen asteen ortogonaalisten polynomien kanta

$$\begin{aligned} P_0^3 &= x^3 + Q_0, & P_1^3 &= x^2y + Q_1 \\ P_2^3 &= xy^2 + Q_2, & P_3^3 &= y^3 + Q_3 \end{aligned} \quad (34)$$

Voidaan näyttää, että maksimissaan kolmella kolmannen asteen ortogonaalisella polynomilla, olkoot ne K_1, K_2 ja K_3 , on seitsemän yhteistä nollakohtaa ja nämä nollakohdat ovat sellaisen kubatuurin pisteet, jonka tarkkuusaste on 5. Ortogonaalisten polynomien välille voidaan muodostaa riippuvuus $xK_1 + yK_2 = K_3$ [23, s. 103]. Kahdelle ensimmäiselle saadaan saadaan edellä esitellyn kannan avulla muodot

$$K_1 = \alpha P_1^3 + \beta P_2^3 + \gamma P_3^3, \quad K_2 = -\alpha P_0^3 - \beta P_1^3 + \gamma P_2^3,$$

jossa α, β ja γ täytyy valita siten, että myös K_3 on kolmannen asteen ortogonaalipolynomi. Jos nyt määritellään vakiot

$$\begin{aligned} A &= \int_{\Omega} (P_0^3 P_2^3 - P_1^3 P_1^3) \, dx dy \\ B &= \int_{\Omega} (P_0^3 P_3^3 - P_1^3 P_2^3) \, dx dy \\ C &= \int_{\Omega} (P_1^3 P_3^3 - P_2^3 P_2^3) \, dx dy, \end{aligned}$$

niin parametrien α, β ja γ ratkaisemiseksi saadaan yhtälöryhmä

$$\begin{bmatrix} 0 & A & B \\ -A & 0 & C \\ -B & -C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{bmatrix}.$$

Nyt jos pätee

$$A^2 + B^2 + C^2 > 0, \quad (35)$$

niin parametrit voidaan määrittää skalaarikerrointa vaille. Muutoin parametrit voidaan valita vapaasti. Ehto (35) on selvästikin riippuvainen vain integrointialueesta ja painofunktiosta. Sellainen alue, jolle ehto (35) ei päde on onnistuttu muodostamaan ja tällöin on mahdollista muodostaa kubatuurisääntö jossa on vain 6 pistettä. Yleisille integroimisalueille, kuten neliölle ja vakio-painofunktiolle, ehto (35) kuitenkin pätee. Kun parametrit on laskettu matriisiyhtälön avulla, saadaan selville K_1 ja K_2 . K_3 saatiin ehdosta $xK_1 + yK_2 = K_3$.

Jos valitaan integroimisalueeksi neliö $C_2 = \{(x, y) \mid |x| \leq 1, |y| \leq 1\}$ ja painofunktioksi vakio 1, niin ratkaisemalla edellä esiteltyt yhtälöt saadaan ortogonaalisiksi polynomeiksi lopulta

$$\begin{aligned} K_1 &= x^3 - \frac{3}{5}x \\ K_2 &= xy^2 - \frac{1}{3}x \\ K_3 &= x^2y + y^3 - \frac{14}{15}y. \end{aligned}$$

Näiden nollakohdista saadaan ratkaistua kubatuurin pisteet, jonka jälkeen painot saadaan pisteiden sijoittamisen jälkeen lineaarisesta yhtälöryhmästä (29). Lopullinen kubatuuri on [23, s. 246]:

$$\int_{C_2} f(x, y) \, dx dy \approx \frac{8}{7}f(0, 0) + \frac{5}{9} \sum_{i=1}^4 f\left(\pm\sqrt{\frac{1}{3}}, \pm\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{20}{63} \left(f\left(\sqrt{\frac{14}{15}}, 0\right) + f\left(-\sqrt{\frac{14}{15}}, 0\right) \right) \quad (36)$$

5 Koeasetelma

Koeasetelmassa keskitytään approksimoimaan kahden muuttujan funktion integraalia

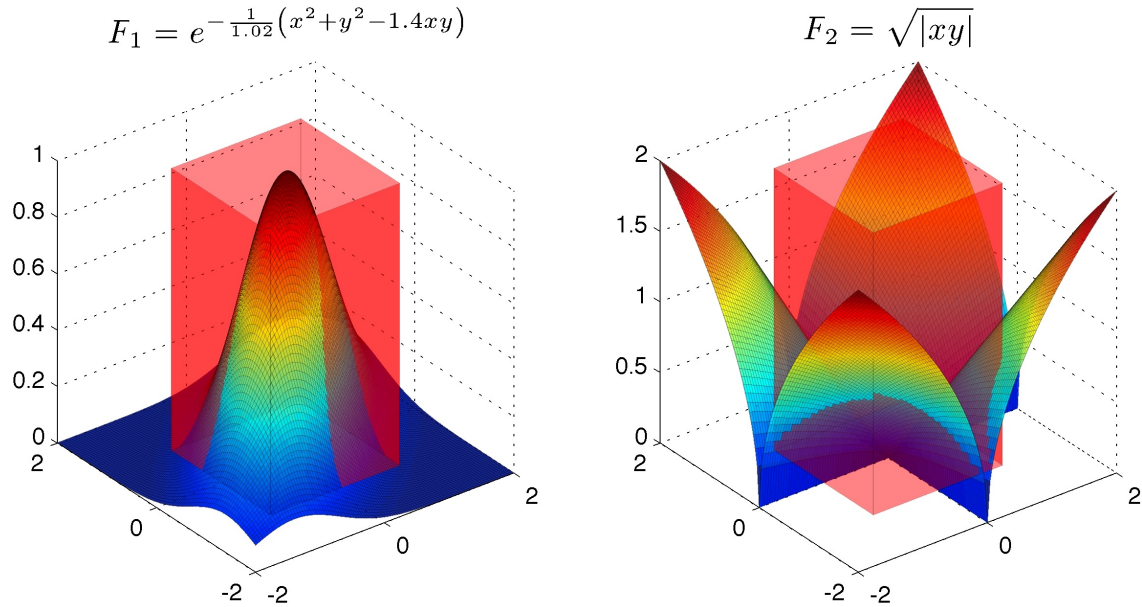
$$I_1[f(x, y)] = \int_{C_2} f(x, y) \, dx dy, \quad (37)$$

jossa siis integroimisalueena on neliö ja painofunktio $w(x) = 1$. Integrandeina käytetään funktioita

$$\begin{aligned} F_1(x, y) &= e^{-\frac{1}{2(1-0.7^2)}(x^2+y^2-1.4xy)} \\ F_2(x, y) &= \sqrt{|xy|}, \end{aligned}$$

joita on havainnollistettu kuvassa 4. F_1 on skalaarikerrointa lukuunottamatta kaksiulotteinen normaalijakauma, jonka odotusarvo on origo ja jonka muuttujien välinen korrelaatio on 0.7. Se on sileä funktio, joten polynomiapproksimaatioihin perustuvien kubatuurien konvergenssin pitäisi olla nopea. Mikäli muuttujien välillä ei olisi korrelaatiota, voisi tällaisen integrandin integroida yksiulotteisten integraalien tulona.

F_2 taas on valittu siten, että sen osittaisderivaatoilla on epäjatkuvuuskohtia. Tällaisen integrandin polynomiapproksimaation konvergenssi on huomattavasti hitaampi kuin sileän funktion tapauksessa. Todellisuudessa tässä tilanteessa kannattaisi hyödyntää integraalin symmetriaa jakamalla integraali neljään identtiseen osaan, jolloin osittaisderivaattojen epäjatkuvuuskohtien yli ei tarvitsisi integroida lainkaan. Nyt on kuitenkin pyritty konstruoimaan kubatuurien kannalta haastava tilanne ja integraalia ei jaeta osiin.



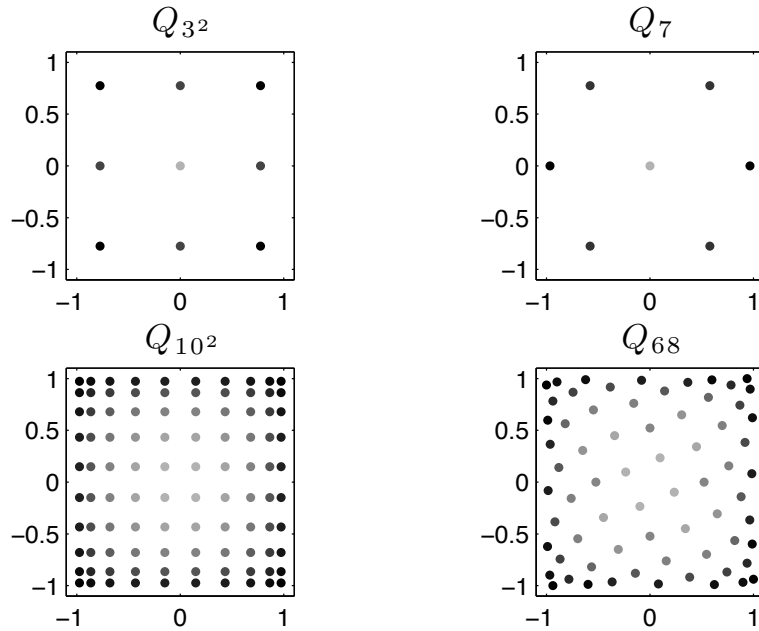
Kuva 4: Ensimmäisen koetilanteen testifunktioiden kuvaajat. Integroimisaluetta $[-1, 1]^2$ on pyritty havainnollistamaan läpinäkyvällä suorakulmaisella särmiöllä. Integraalin arvo on särmiön ja funktion kuvaajan rajaama tilavuus.

Kubatuureiksi valitaan seuraavat menetelmät:

- $Q_{3^2} := 9$ -pisteinen tulosääntö, joka perustuu aiemmin johdettuun 3-pisteiseen Gaussin kvadratuuriin
- $Q_7 := 7$ -pisteinen Radonin minimisääntö
- $Q_{10^2} := 100$ -pisteinen tulosääntö, joka perustuu 10-pisteiseen Gaussin kvadratuuriin
- $Q_{68} := 68$ -pisteinen rotaatioinvariantti korkean tarkkuusasteen kubatuuri.

Q_{3^2} :n yleinen tarkkuusaste on 5, kuten myös Q_7 :n tarkkuusaste. Q_{10^2} :n yleinen tarkkuusaste on 19. Q_{68} :n tarkkuusaste on 19 ja se on johdettu aiemmin esiteltyä invarianttimenetelmää käyttäen [18]. Sen tukipisteiden määrä on myös pienin tunnettu sarjassaan. Q_{3^2} :n ja Q_{10^2} laskemiseksi käytettiin jo aiemmin mainittua MATLAB-funktiota, jonka perusteella muodostettiin kaksiulotteinen tulosaäntö. Funktio on esitetty liitteessä A.

Kunkin kubatuurin käyttämät tukipisteet on merkitty kuvaan 5, jossa pisteen tummuus vastaa sen saamaa painoa (mitä tummempi, sitä suurempi paino). Q_{10^2} :n ja Q_{10^2} :n pisteiden jakaumat heijastavat niiden tulomuotoa. Selvästi on myös havaittavissa, että pisteiden jakauma on tiheämpi ja painot suuremmat alueen reunoilla kuin sen keskellä.



Kuva 5: Koasetelmassa käytettyjen kubatuurien tukipisteet integroimisalueessa C_2 . Pisteen tummuus vastaa sen saamaa painoa.

6 Tulokset

Koeasetelman tulokset on esitetty taulukossa 3. Siihen on lisäksi laskettu suhteellinen virhe $E[f]$, joka on saatu vertaamalla kubatuurin tulosta oikeaan tulokseen. Ensimmäisen integrandin tapauksessa on hyödynnetty MATLAB:in *mvncdf* funktiota, joka pystyy takaamaan annetun virhetoleranssin. Toiselle integrandille taas on käytetty MATLAB:in funktiota *dblquad*, joka on tulomenetelmä ja perustuu kvadratuurifunktioon *quad* [16]. Myös *dblquad* pystyy takaamaan annetun virhetoleranssin.

Tulosten perusteella kaikki neljä kubatuurisääntöä suoriutuivat F_1 :n integroimisesta hyväksyttävästi. Q_7 :n 2.6%:n virhe on tosin melkein 9 kertaa suurempi kuin toiseksi suurin virhe. Tämä johtuu todennäköisesti siitä, että Q_{3^2} integroi tarkasti

Taulukko 3: Koeasetelman tulokset

Kubatuuri	$Q[F_1]$	$E[F_1]$	$Q[F_2]$	$E[F_2]$
Q_{3^2}	2.40428	0.3%	0.95629	46.2%
Q_7	2.46015	2.6%	1.48609	16.4%
Q_{68}	2.39773	0.0%	1.83156	3.0%
Q_{10^2}	2.39773	0.0%	1.74004	2.1%

hieman suuremman joukon polynomeja kuin Q_7 (Q_{3^2} :n *yleinen* tarkkuusaste on sama kuin Q_7 :n tarkkuusaste). Esimerkiksi $E[Q_{3^2}[x^5y^5]] = 0$, mutta $E[Q_7[x^5y^5]] \neq 0$. Kuten oli odotettavissa, Q_{10^2} ja Q_{68} saavuttivat erittäin tarkan tuloksen. Se, että Q_{10^2} :n absoluuttinen virhe oli luokkaa 10^{-13} ja Q_{68} :n luokkaa 10^{-9} johtuneen myös tässä tapauksessa tulosäännön yleisestä tarkkuusasteesta.

F_2 tuotti alhaisen tarkkuusasteen kubatuureille Q_{3^2} ja Q_7 huomattavia ongelmia. Kummankaan tulos ei ole käyttökelpoinen, mutta Q_{3^2} :n virhe on todella suuri. Tämän täytyy johtua tukipisteiden sijoittumisesta epäedullisesti F_2 :n integroinnin suhteen. Korkean tarkkuusasteen säännöt saavuttavat hankalasta integrandista huolimatta melko hyvän tuloksen ja tulosäännön hiukan pienempi virhe johtuneen jälleen sen yleisestä tarkkuusasteesta. Kuten aiemmin jo todettiin, parempiin tuloksiin pääsemiseksi tulisi hyödyntää integraalin symmetriaa.

7 Yhteenveto

Yhden muuttujan funktioiden numeerinen integrointi on ongelma, jonka ratkaisemiseksi on tarjolla tehokkaita menetelmiä. Annetulla tukipisteiden määrällä ovat Gaussin kvadratuurit näistä polynomiapproksimaation kannalta tarkimpia. Niiden käyttäminen vaatii kuitenkin painojen selvittämisen lisäksi myös tukipisteiden laskemisen, joka kuitenkin onnistuu ratkaisemalla tiettyjen ortogonaalisten polynomien nollakohtia. Useimmissa tapauksissa riittää niinkin yksinkertainen keino kuin Simpsonin menetelmä, jonka adaptiivista versiota käyttää esimerkiksi MATLAB:in kvadratuurifunktio *quad* [16]. Konvergenssi on taattu, jos integroimisväli vain jaetaan tarpeeksi pieniin osiin ja huomioidaan mahdolliset derivataan epäjatkuvuuskohdat.

Tilanne muodostuu huomattavasti ongelmallisemmaksi muuttujien määrän, eli integraalin dimension, kasvaessa. Tällöin erilaisia integroimisalueita on ääretön määrä. Mikäli integroimisalue (ja painofunktio) on mahdollista saattaa tulomuotoon, voidaan ainakin kahdessa ja kolmessa dimensiassa hyvin käyttää yhden dimension menetelmään, yleensä Gaussin kvadratuuriin, perustuvaa tulosääntöä. Tulosääntöjä käytettäessä tarvittavien pisteiden, ja siis funktioevaluaatioiden, määrä kasvaa eksponentiaalisesti dimension suhteen. Tätä kutsutaan dimensionaalisuuden kiroukseksi.

Dimensionaalisuuden kirousta on mahdollista paeta käyttämällä interpolatorisia kubatuureja. Tällöin vaadittavien funktioevaluaatioiden määrä ei enää riipu eksponentiaalisesti dimensiosta. Näiden menetelmien suurin ongelma on kuitenkin niiden määrittäminen. Gaussin kvadratuurin idea voidaan muotoilla myös monessa ulot-

tuvuudessa, mutta analogisen kubatuurin olemassaolo vaatii, että integroimisalueesta ja painofunktiosta riippuvilla moniulotteisilla ortogonaalisilla polynomeilla on tarpeeksi suuri määrä yhteisiä nollakohtia. Tiedetään, että näin ei ole tavallisten integroimisalueiden, kuten neliön tai kolmion, ja vakiopainofunktion tapauksessa.

Vaikka tavallisesti ei voidakaan saavuttaa Gaussin kvadratuurien mielessä optimaalista pisteiden määrää, interpolatorinen kubatuuri on kuitenkin olemassa jokaiselle integraalille. Sen määrittäminen voi kuitenkin olla äärimmäisen vaikeaa, sillä se vaatii suuren epälineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemista. Vaikeutta lisää myös se, että yleisessä tapauksessa vaadittavien pisteiden vähimmäismäärää ei tiedetä ja jotta yhtälöryhmä voitaisiin edes muodostaa, täytyisi pistemäärälle saada jokin arvio. Tilannetta voidaan helpottaa hyödyntämällä approksimoitavan integraalin symmetriaa. Pakottamalla etsittäväälle kubatuurisäännölle tietty symmetria voidaan yhtälöryhmää huomattavasti pienentää ja sen jälkeen se voidaan yrittää ratkaista hyödyntämällä tietokoneiden suurta laskentatehoa [4, s. 6]. Tyypillinen esimerkki tällaisesta proseduurista löytyy lähteestä [22]. Kattava tietokanta julkaistuista interpolatorisista kubatuureista on pyritty muodostamaan lähteessä [5].

Vaikka interpolatoristen kubatuurien ratkaiseminen olisi helpompaa, on selvää että joka tapauksessa vaadittavien pisteiden määrä nousee liian suureksi jos dimensioita on muutamaa kymmentä enemmän. Tällöin täytyy turvautua täysin eri typisiin menetelmiin, kuten erilaisiin Monte-Carlo menetelmiin. Suuridimensioisia integraaleja käsitellään esimerkiksi lähteissä [6, 7].

Viitteet

- [1] I. Arasaratnam ja S. Haykin: *Cubature Kalman Filters*. IEEE Transactions on Automatic Control, 54(6):1254–1269, 2009, ISSN 0018-9286.
- [2] W. Cheney ja D. Kincaid: *Numerical mathematics and computing*. Cengage Learning, 6 p., 2007, ISBN 0495114758, 9780495114758.
- [3] R. Cools: *Constructing cubature formulae: the science behind the art*. Acta Numerica, 6:1, mar. 1997, ISSN 0962-4929.
- [4] R. Cools: *Advances in multidimensional integration*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 149(1):1–12, 2002, ISSN 03770427.
- [5] R. Cools: *An encyclopaedia of cubature formulas*. J. Complexity, 19(3):445, 2003.
- [6] R. Cools, D. Huybrechs ja D. Nuyens: *Recent topics in numerical integration*. International Journal of Quantum Chemistry, 109(8):1748–1755, 2009.
- [7] R. Cools, F. Y. Kuo ja D. Nuyens: *Constructing lattice rules based on weighted degree of exactness and worst case error*. Computing, 2010, ISSN 0010-485X.
- [8] R. Cools, I. P. Mysovskikh ja H. J. Schmid: *Cubature formulae and orthogonal polynomials*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 127(1-2):121–152, 2001, ISSN 03770427.
- [9] P. J. Davis ja P. Rabinowitz: *Methods of numerical integration*. Academic Press, 1975, ISBN 0122063503, 9780122063503.
- [10] C. Gauss: *Methodus nova integralium valores per approximationem inveniendi*. Commentationes Societatis Regiae Scientiarum Gottingensis Recentiores 2, ss. 163–196, 1814.
- [11] W. Gautschi: *Numerical analysis: an introduction*. Springer, 1997, ISBN 0817638954, 9780817638955.
- [12] A. Hinrichs ja E. Novak: *Cubature formulas for symmetric measures in higher dimensions with few points*. Mathematics of computation, 76(259):1357–1372, 2007.
- [13] V. I. Krylov: *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962.
- [14] F. Y. Kuo ja I. Sloan: *Lifting the curse of dimensionality*. Notices of the AMS, 52(11):1320–1328, 2005.
- [15] J. Lu ja D. Darmofal: *Higher-dimensional Integration with Gaussian Weight for Applications in Probabilistic Design*. SIAM Journal on Scientific Computing, 26(2):613–624, 2005.

- [16] The MathWorks, Inc., 3 Apple Hill Drive Natick, MA 01760-2098. USA.: *'quad'-funktion lähdekoodi*, 2008. saadaan näkyville MATLAB:issa komennolla 'type quad'.
- [17] H. M. Möller: *Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl*. Numerische Mathematik, 25(2):185–200, kes. 1976, ISSN 0029-599X.
- [18] I. Omelyan ja V. Solovyan: *Improved cubature formulae of high degrees of exactness for the square*. Journal of Computational and Applied Mathematics, 188(2):190–204, 2006, ISSN 03770427.
- [19] J. Radon: *Zur mechanischen Kubatur*. Monatshefte für Mathematik, 52(4):286–300, jou. 1948, ISSN 0026-9255.
- [20] H. Schmid: *Interpolatorische Kubaturformeln und reelle Ideale*. Mathematische Zeitschrift, 170(3):267–282, elo. 1980, ISSN 1095-9203.
- [21] J. Stoer ja R. Bulirsch: *Introduction to numerical analysis*. Springer, 2 p., 1993.
- [22] S. B. Stoyanova: *An invariant cubature formula of degree nine for a hypercube*. Vestnik St. Petersburg University: Mathematics, 42(2):135–140, toukokuuta 2009, ISSN 1063-4541.
- [23] A. H. Stroud: *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [24] L. N. Trefethen: *Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw–Curtis?* SIAM Review, 50(1):67, 2008, ISSN 00361445.
- [25] L. N. Trefethen ja D. Bau: *Numerical linear algebra*. SIAM, 1997, ISBN 0898713617, 9780898713619.
- [26] C. W. Ueberhuber: *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997, ISBN 3540620575, 9783540620570.
- [27] O. Zienkiewicz, R. Taylor ja J. Zhu: *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*. Elsevier Butterworth-Heinemann, 6 p., 2005, ISBN 0 7506 6320 0.

A MATLAB-funktio

```

1 function [I,Xr,Yr,Wr] = gauss2D(f,n)
2 % gauss2D (n+1)^2 point product-rule based on Gauss quadrature
3 %
4 % This function uses the gauss(f,n)
5 % function presented by Trefethen [1].
6 % Integration is done over  $[-1,1]^2$  and
7 %  $w(x,y)=1$ .
8 %
9 %[1] L.N. Trefethen: Is Gauss Quadrature Better than Clenshaw-Curtis?
10 % SIAM Review, 50(1):67, 2008, ISSN 00361445.
11
12 beta = .5./sqrt(1-(2*(1:n)).^(-2)); % 3-term recurrence coeffs
13 T = diag(beta,1) + diag(beta,-1); % Jacobi matrix
14 [V,D] = eig(T); % eigenvalue decomposition
15 x = diag(D); [x,i] = sort(x); % nodes (= Legendre points)
16 w = 2*V(1,i).^2; % weights
17 [X,Y]=meshgrid(x); % 2-D points
18 [W1,W2]=meshgrid(w); % 2-D weights
19 I = sum(sum(W1.*W2.*feval(f,X,Y))); % integral
20 Xr = reshape(X,length(X)^2,1); % x-coordinates
21 Yr = reshape(Y,length(Y)^2,1); % y-coordinates
22 Wr = reshape(W1.*W2,length(W1)^2,1); % weights
23
24 end

```