

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	2
2.1 Geometrinen tulkinta	2
2.2 Numeerisia menetelmiä	2
2.2.1 Polynominen interpolaatio	4
2.2.2 Newton-Cotes menetelmät	4
3 Yksiulotteinen kvadratuuri-integrointi	5
3.1 Ortogonaaliset polynomikannat	5
3.2 Gaussinen kvadratuuri	5
3.3 Gauss-Hermite kvadratuuri	5
3.4 Muita Gaussisia kvadratuureja	5
4 Moniulotteinen kvadratuuri-integrointi	5
4.1 Tulosäännöt	5
4.2 Kubatuurit	5
4.2.1 Gauss-Hermite	5
4.3 Muita menetelmiä	5
5 Koeasetelma	5
6 Tulokset	5
7 Yhteenveto	5
Viitteet	6

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. Matemaattinen konstruktio, jolla on läheinen yhteys tähän ongelmaan on *integraali*. Tänä päivänä tekniikan alan ammattilaiset arkkitehteistä tilastotieteilijöihin tarvitsevat työssään tarkkoja ja tehokkaita keinoja integraalien määrittämiseen.

Numeerinen integrointi on sovelletun matematiikan alalaji, joka pyrkii vastaamaan tähän tarpeeseen. 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. Jos kuitenkin dimensioita on enemmän, on ongelma, ehkä hieman yllättäen, kaikkea muuta kuin ratkaistu.

Tässä kandidaatintyössä pyritään esittämään syitä siihen miksi näin on. Samalla luodaan katsaus niihin ongelmiin joihin törmätään, kun yhdessä ulottuvuudessa niin erinomaisia tuloksia tuottavia *Gaussisia kvadratuureja* sovelletaan useassa ulottuvuudessa. Gaussisten kvadratuurien erinomaisuudesta seuraa luonnollisesti kysymys siitä, voidaanko sen periaatteita soveltaa usean ulottuvuuden integraalilaskusääntöjen, *kubatuurien*, muodostamisessa ja jos voidaan, kykenevätkö ne yhtä hyvään suoritukseen.

Tässä työssä käydään ensin läpi tarvittavat esitiedot (kuten Riemann integraali ja polynominen approksimaatio), jotta voidaan esittää Gaussisten kvadratuurien, siis yhden ulottuvuuden numeeristen integrointisääntöjen, idea. Tämän jälkeen luodaan katsaus usean ulottuvuuden numeeriseen integrointiin, keskittyen Gaussisten kvadratuurien yleistämiseen kubatuureiksi (on myös muita usean ulottuvuuden numeerisia integrointimenelmiä, kuten Monte-Carlo menetelmät). Teoreettisen selvityksen jälkeen vertaillaan eräitä kiinnostavia menetelmiä keskenään soveltamalla niitä esimerkki-integraaleihin useissa eri dimensioissa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteella tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

[2, 5, 9, 4, 3, 8, 10, 6, 11, 1]

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. Jokainen suljetulla välillä $[a, b]$ jatkuva ja rajoitettu 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*:

$$\int_a^b f(x) \, dx = \int_a^b F'(x) \, dx = F(b) - F(a) \quad (1)$$

Huomionarvoista on se, että määrätyn integraalin *olemassaolo* ei ole millään tavalla riippuvainen integraalifunktion $F(x)$ olemassaolosta.[1]

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*

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

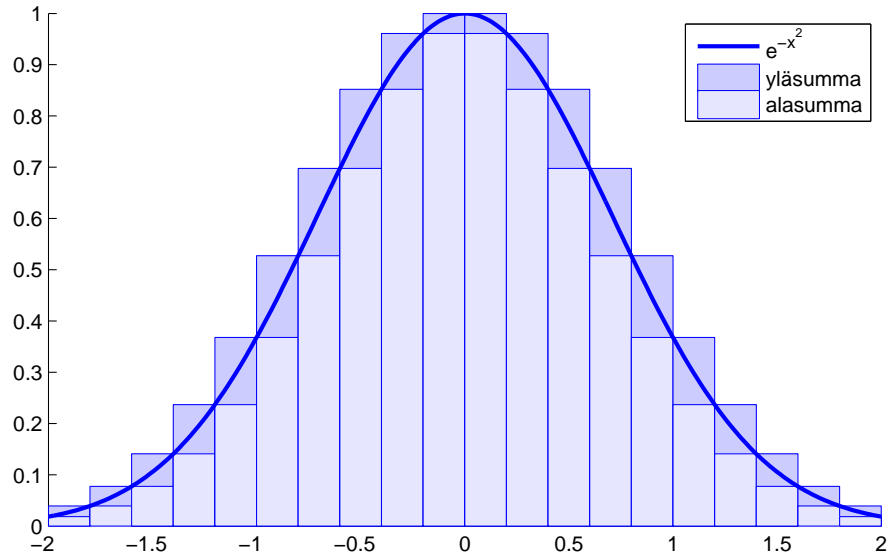
avulla: jos pätee $\lim_{n \rightarrow \infty} |P_n| = 0$, niin

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} U_{P_n}(f) = \limsup_{n \rightarrow \infty} L_{P_n}(f) = S \implies \int_a^b f(x) \, dx = S \quad (2)$$

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

2.2 Numeerisia menetelmiä

Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakulmio-menetelmä* [11]. Kuvan 1 esittämässä tapauksessa saadaan $L_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.57$ ja



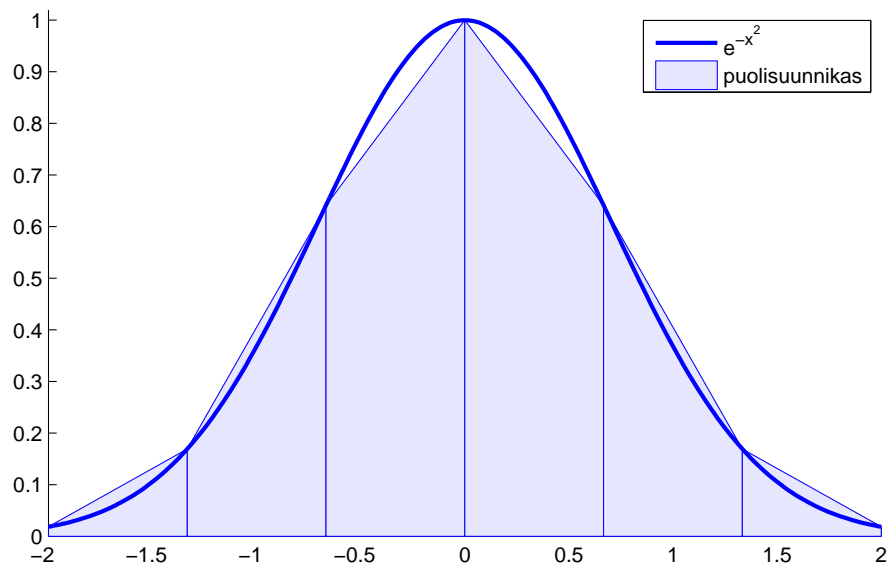
Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

$U_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.96$, 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 *puolisuunnikkasmenetelmällä*, jossa myös käytetään tasavälistä jakoa $P_n = \{x_i \mid x_i = a + hi\}$, mutta suorakulmiot on korvattu puolisuunnikkailla:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n \frac{h}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \quad (3)$$

Puolisuunnikkasmenetelmää on havainnollistettu kuvassa 2.[7]



Kuva 2: Puolisuunnikkasmenetelmä

Puolisuunnikasmenetelmä voidaan tulkita myös siten, että integroitavaa funktiota approksimoidaan jokaisella välillä suoralla, joka kulkee välin päätepisteiden kautta. Alkuperäinen integraali on siis n :n ensimmäisen asteen polynomin integraalien summa. Tällaisen tulkinnan siivittämänä puolisuunnikasmenetelmälle löytyy ilmeinen parannusehdotus: käytetään approksimointiin korkeamman asteen polynomia.[7]

2.2.1 Polynominen interpolaatio

Polynomisella interpolaatiolla tarkoitetaan sellaisen polynomin p löytämistä, joka ratkaisee seuraavan ongelman: etsi polynomi p , jolle pätee $p(x_i) = y_i \quad \forall i$, kun $\{x_i\}$ on $n+1$ erillistä pistettä ja $\{y_i\} \in \mathbb{R}$ niitä vastaavat mielivaltaiset arvot. Osoittautuu että, p on aina olemassa, se on ainutkertainen ja sen asteluku on korkeintaan n . [1]

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

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

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

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 $\text{Deg}(p) = n$.

2.2.2 Newton-Cotes menetelmät

Jos nyt käytetään f :n tilalla edellä määriteltyä interpoloivaa polynomia p , saadaan

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) \, dx &\approx \int_a^b p(x) \, dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n \ell_i(x) f(x_i) \, dx \\ &= \sum_{i=0}^n \left(f(x_i) \underbrace{\int_a^b \ell_i(x) \, dx}_{w_i} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Käyttämällä kaavaa 4 jokaisella tasavälisen jaon välillä, saadaan ryhmä numeerisen integroinnin menetelmiä jotka tunnetaan nimellä *Newton-Cotes* menetelmät ja jotka poikkeavat toisistaan siinä, montako pistettä interpolointiin käytetään ja ovatko välin päätepisteet mukana (suljettu menetelmä) vai eivät (avoin menetelmä).[7]

Havaitaan, että mikäli jokaiselta väliltä valitaan välin päätepisteet, saadaan edellä esitelty puolisuunnikasmenetelmä (3) ja mikäli valitaan päätepisteiden lisäksi välin keskipiste $\frac{x_i+x_{i+1}}{2}$ saadaan laajalti käytetty *Simpsonin* menetelmä: [7]

$$\int_a^b f(x) \, dx \approx \sum_{i=0}^n \frac{h}{6} \left(f(x_i) + 4f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right) \quad (5)$$

3 Yksiulotteinen kvadratuuri-integrointi

3.1 Ortogonaaliset polynomikannat

3.2 Gaussinen kvadratuuri

3.3 Gauss-Hermite kvadratuuri

3.4 Muita Gaussisia kvadratuureja

4 Moniulotteinen kvadratuuri-integrointi

4.1 Tulosäännöt

4.2 Kubatuurit

4.2.1 Gauss-Hermite

4.3 Muita menetelmiä

5 Koeasetelma

6 Tulokset

7 Yhteenveto

Viitteet

- [1] W. Cheney and D. Kincaid. *Numerical mathematics and computing*. Cengage Learning, 6 edition, 2007.
- [2] R. Cools. Advances in multidimensional integration. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 149(1):1–12, 2002.
- [3] R. Cools. The state of the art of constructing cubature formulas for multivariate integrals. *FEMTEC 2006*, page 4, 2006.
- [4] R. Cools, D. Huybrechs, and D. Nuyens. Recent topics in numerical integration. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(8):1748–1755, 2009.
- [5] R. Cools, I. P. Mysovskikh, and H. J. Schmid. Cubature formulae and orthogonal polynomials. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 127(1-2):121–152, 2001.
- [6] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of numerical integration*. Academic Press, 1975.
- [7] W. Gautschi. *Numerical analysis: an introduction*. Springer, 1997.
- [8] V. I. Krylov. *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962.
- [9] F. Y. Kuo, I. H. Sloan, G. W. Wasilkowski, and H. Woźniakowski. Liberating the dimension. *Journal of Complexity*, 2010.
- [10] A. H. Stroud. *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [11] C. W. Ueberhuber. *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997.