Ville Väänänen

Numeerinen integrointi: kvadratuureista kubatuureihin

Elektroniikan, tietoliikenteen ja automaation tiedekunta

Kandidaatintyö Espoo 10.5.2010

Vastuuopettaja:

Prof. Markus Turunen

Työn ohjaaja:

TkT Simo Särkkä



Esipuhe

Espoo 10.5.2010

 $1 \mathrm{cm}$

Sisältö

$\mathbf{E}_{\mathbf{S}}$	sipuhe	iii			
\mathbf{Si}	isällysluettelo	iv			
1	Johdanto	1			
2	Integraalin ominaisuuksia 2.1 Määritelmä 2.2 Geometrinen tulkinta 2.3 Approksimointi 2.3.1 Interpolointi	2 2 2 2 2			
3	Ortogonaaliset polynomit 3.1 Ortogonaalisuus	2 2 2			
4	Kvadratuurit 4.1 Gaussiset kvadratuurit	2 2			
5	Numeerinen integrointi useassa ulottuvuudessa 5.1 Tulosäännöt	2 2 2 2 2			
6	Koeasetelma	2			
7	7 Tulokset				
8	Yhteenveto	2			
V	Tiitteet	3			

1 Johdanto

Matematiikan sovelluskohteista eräas ensiksi mieleen tulevista on pinta-alojen ja tilavuuksien laskeminen. Ei siis ole ylläattäaväaä, että jo kauan on tiedetty keinoja muuntaa pinta-aloja kvadratuureiksi, samansuuruisiksi suorakulmioiksi. Tänä päivänä insinöörit arkkitehdeistä tilastotieteilijöihin tarvitsevat työssään tarkkoja ja tehokkaita keinoja integraalien määrittämiseen.

Sovelletun matematiikan alalaji, joka pyrkii vastaamaan tähän tarpeeseen on numeerinen integrointi. Alalta on aikojen saatossa julkaistu suunnaton määrä tutkimustuloksia ja kirjallisuutta, joten minkä tahansa käytännössä esiintyvän integraalin ratkaisemiseen voisi olettaa löytyvän laskennallisesti tehokas ratkaisualgoritmi. 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 tarjoamaan selvitys miksi näin on. Lähinnä keskitytään siihen, miksi yhdessä ulottuvuudessa niin erinomaisia tuloksia tuottavat Gaussiset kvadratuurit eivät kykene samaan useassa ulottuvuudessa. Lisäksi esitellään täysin toisen tyyppinen, mutta hyvin yleisesti käytetty Monte-Carlo mentelmä sekä hyvin pintapuolisesti tällä hetkellä suuren kiinnostuksen kohteena olevat kvasi Monte-Carlo menetelmät.

Teoreettisen selvityksen jälkeen vertaillaan mainittuja menetelmiä keskenään soveltamalla niitä esimerkki-integraaleihin useissa eri dimensioissa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteellä tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

Koska käsiteltävä aihe on laaja ja monimutkainen ja kandidaatintyön laajuus on melko rajallinen, ei alan tämän hetkisestä tilanteesta voida antaa kattavaa selvitystä. Kiinnostunutta lukijaa kehotetaan tutustumaan viitteisiin [4] ja edelleen niissä esiteltyyn kirjallisuuten.

[2, 5, 8, 4, 3, 7, 9, 6, 10, 1]

- 2 Integraalin ominaisuuksia
- 2.1 Määritelmä
- 2.2 Geometrinen tulkinta
- 2.3 Approksimointi
- 2.3.1 Interpolointi
- 3 Ortogonaaliset polynomit
- 3.1 Ortogonaalisuus
- 3.2 Polynomikannat
- 4 Kvadratuurit
- 4.1 Gaussiset kvadratuurit
- 5 Numeerinen integrointi useassa ulottuvuudessa
- 5.1 Tulosäännöt
- 5.2 Kubatuurit
- 5.2.1 Yleistämisen ongelmat
- 5.3 Monte-Carlo menetelmät
- 6 Koeasetelma
- 7 Tulokset
- 8 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] V. I. Krylov. Approximate calculation of integrals. Macmillan, 1962.
- [8] F. Y. Kuo, I. H. Sloan, G. W. Wasilkowski, and H. Woźniakowski. Liberating the dimension. *Journal of Complexity*, 2010.
- [9] A. H. Stroud. Approximate calculation of multiple integrals. Prentice-Hall, 1971.
- [10] C. W. Ueberhuber. Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2. Springer, 1997.