

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 Määritelmä . . . . .	3
<b>3 Kvadratuurit</b>	<b>4</b>
3.1 Polynomiapproksimaatio . . . . .	5
3.2 Newton-Cotes menetelmät . . . . .	6
3.3 Gaussin kvadratuuri . . . . .	8
3.3.1 Ortogonaaliset polynomit . . . . .	9
3.3.2 Ominaisuuksia . . . . .	10
3.3.3 Laskeminen . . . . .	11
<b>4 Kubatuurit</b>	<b>13</b>
4.1 Integroimisalueet . . . . .	14
4.2 Tulosäännöt . . . . .	14
4.3 Interpolatoriset kubatuurit . . . . .	15
4.3.1 Moniulotteiset ortogonaaliset polynomit . . . . .	16
4.3.2 Symmetriasta . . . . .	17
4.3.3 Alarajoista . . . . .	17
4.4 Radonin 7 pisteinen kaava tasoalueille . . . . .	18
<b>5 Koeasetelma</b>	<b>19</b>
<b>6 Tulokset</b>	<b>19</b>
<b>7 Yhteenveto</b>	<b>19</b>
<b>Viitteet</b>	<b>20</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 [17, 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 [13]. 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 [16]. Näin todennäköisesti onkin mikäli ongelmallinen integraali on määriteltä 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

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

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. 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* [7]. Kyseessä on elegantti kvadratuuri, jossa hyödynnetään *ortogonaalisia polynomeja* ja saavutetaan suuri tarkkuus pienellä funktio-evaluaatioiden määrällä. Tästä vaikuttuneena kirjoitti aikalaisensa Friedrich Bessel, myöskin tunnustettu matemaatikko, hänelle seuraavasti:

“Nyt kun olen saanut haltuuni numeerista integrointia käsittelevän paperin, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvästä, jonka olette minulle suoneet”[16]

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 tässä työssä ymmärretään [3]. Tämän jälkeen kubatuureista ei ole juurikaan merkintöjä ennen vuotta 1948, jolloin Radon julkaisi kuohuntaa aiheuttaneen väitöskirjansa [11].

Useampiulotteisten integraalien likimääräiseen ratkaisemiseen on täysin eri tyyppiäkin 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 [9]. 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 dimensiossa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteella tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

## 2 Riemann integraali

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

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

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

### 2.1 Määritelmä

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

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

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

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

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

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

Eräitä Riemann-summia, tarkemmin sanottuna ala- ja yläsummia, on havainnollistettu kuvassa 1 (jaon ei välttämättä tarvitse olla tasavälinen), josta on helppo nähdä, että jaon tihentyessä summat suppenevat samaan arvoon, joka vastaa kuvaajan  $y = f(x)$  ja  $x$ -akselin rajaamaa pinta-alaa.[6]

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

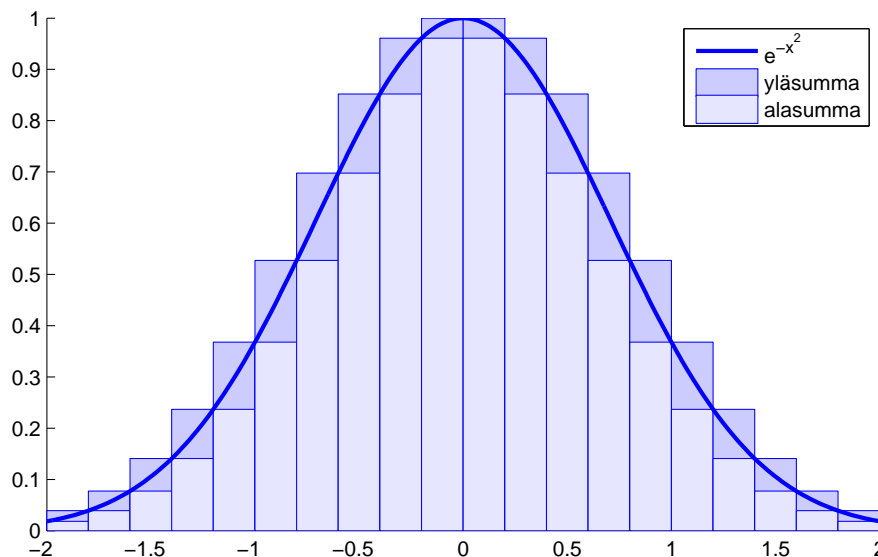
$$\int_a^\infty f(x) dx = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_a^r f(x) dx,$$

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

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

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

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



Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

### 3 Kvadratuurit

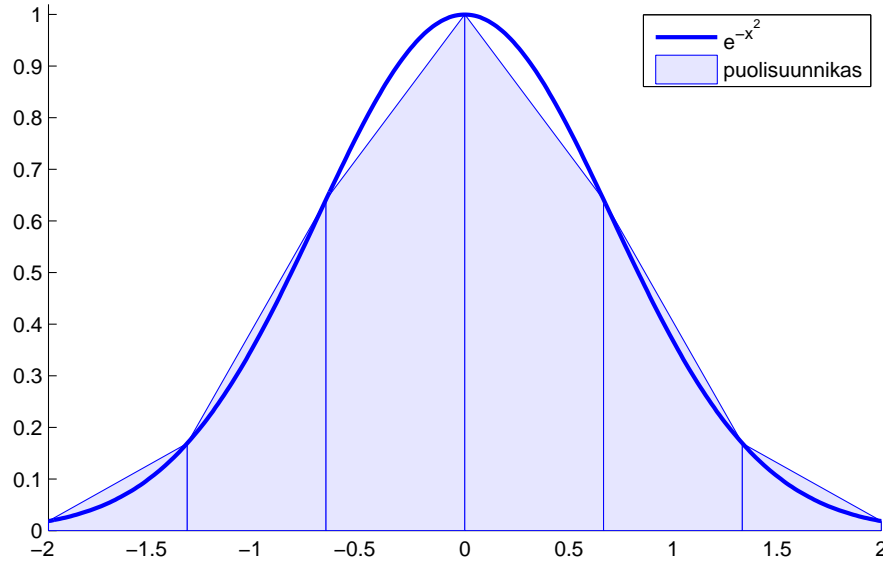
Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakaide-menetelmä* [16]. Kuvan 1 esittämässä tapauksessa saadaan  $L_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.57$  ja  $U_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.96$ , 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 *puolisuunnikkasmenetelmällä*, 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.[7]



Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

Sekä suorakulmiomenetelmä, että puolisuunnikasmenetelmä voidaan tulkita siten, että integrandia approksimoidaan jokaisella välillä vakiofunktioilla (0:nneen asteen polynomi) tai vastaavasti ensimmäisen asteen polynomilla. Alkuperäinen integraali on siis  $n$ :n polynomintegraalin summa. Tällaisen tulkinnan siivittämänä näille menetelmille löytyy ilmeinen parannusehdotus: käytetään approksimointiin korkeamman asteen polynomia.[7]

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

$$\|f - \hat{\varphi}\| \leq \|f - \varphi\| \quad \forall \varphi \in \Phi. [7] \quad (5)$$

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

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

jolloin puhutaan *pienimmän neliösumman* menetelmästä. Diskreetissä tapauksessa

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

Jos approksimaatioalue on diskreetti (tiedetään pisteet, jotka approksimaation on toteutettava) ja approksimaatiolle  $\hat{\varphi}$  pätee  $\|f - \hat{\varphi}\| = 0$ , niin silloin  $\hat{\varphi}(t_i) = f(t_i) \quad \forall i = 1, \dots, N$  ja sanotaan että  $\hat{\varphi}$  *interpoloi* funktiota  $f$  pisteissä  $t_i$ . [7]

*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 [6]. 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 [6][7].

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:

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

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

Nyt jos  $p$  määritellään  $\ell_i$ :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 *paloittaiseksi* (eng. *compound* tai *composite*) [6]. Jos integrointiväli on jaettu

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

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

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

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

Tällä tavalla muodostetut menetelmät tunnetaan nimellä *Newton-Cotes* menetelmät ja ne poikkeavat toisistaan interpolaatiopisteiden lukumäärässä. Jos välin päätepisteet kuuluvat interpolaatiopisteiden joukkoon, menetelmää kutsutaan suljetuksi ja jos eivät, niin avoimeksi. [7]

Havaitaan, että mikäli kaavassa 8 valitaan  $n = 1$ , ja sovelletaan sitä toistuvasti usealla osavälillä, saadaan edellä esitelty puolisuunnikasmenetelmä (4). Jos taas valitaan  $n = 2$ , eli interpolaatioon käytetään kolmea pistettä, saadaan laajalti käytetty *Simpsonin* menetelmä: [7]

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

Virheen  $E_n(p)$  pienentämiseksi voidaan nähdä kaksi eri lähestymistapaa: joko käytetään pienen  $n$ :n Newton-Cotes kaavaa aina vain lyhyemmillä osaväleillä tai käytetään pidempiä osavälejä mutta suurta  $n$ :ää. Ensimmäisessä tapauksessa evaluointipisteiden määrä kasvaa nopeasti epäkäytännöllisen suureksi. Kuitenkin sekä puolisuunnikasmenetelmä että Simpsonin menetelmä ovat erittäin laajalti käytettyjä ja voidaan näyttää, että kun osavälien määrä  $N \rightarrow \infty$  niin  $E_n(p) \rightarrow 0$  kaikille integrointivälillä jatkuville funktioille. Toisessa tapauksessa  $n : n$  kasvaessa suureksi, voivat painot  $w_i$  olla joko positiivisia tai negatiivisia ja absoluuttiselta arvoltaan milivaltaisen suuria, jolloin nämä menetelmät eivät enää ole numeerisessa mielessä stabiileja. Tämän vuoksi korkean tarkkuusasteen Newton-Cotes menetelmiä ei juurikaan käytetä. [8]

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

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

### 3.3 Gaussin kvadratuuri

Tarkastellaan nyt kaavan (1) mukaista integroimissääntöä yhdessä ulottuvuudessa

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

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

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

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

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

ovat määritellyt [7]. Newton-Cotes kaavojen perusteella tiedetään, että mikäli on annetut mitkä tahansa  $n$  pistettä, niin voidaan määrittää kaava (10), jonka tarkkuusaste on  $d = n - 1$ . Voidaan kuitenkin osoittaa, että muotoa (10) olevan kvadratuurin maksimaalinen tarkkuusaste on  $d = 2n - 1$ , mikäli jokainen  $n$ :stä solmusta saadaan valita vapaasti [7].

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

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

Nyt jos ja vain jos solmupolynomille pätee

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

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

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

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

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

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

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

kun taas

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

joten

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

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

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

mutta

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

joten sääntö ei ole tarkka polynomeille astetta  $2n$  [8].

### 3.3.1 Ortogonaaliset polynomit

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

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

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

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

ja *ortonormaali* mikäli lisäksi pätee

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

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

Mikä tahansa lineaarisesti riippumaton joukko, kuten esimerkiksi edellä esitelty monomikanta, on mahdollista ortogonalisoida *Gram-Schmidt*-proseduurin avulla [7, s.65]. Näin jokaista, edellä mainitut ehdot täyttävää, painofunktiota kohti on olemassa oma ortogonaalisten polynomien joukkonsa  $\pi_{j,w}$  ( $\text{Deg} \pi_j = j$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots$ ) ja  $\omega_n = \pi_{n,w}$ . Joitakin painofunktioita vastaavat ortogonaaliset polynomit tunnetaan *klassisina* ja ne on esitelty taulukossa 1. Solmupolynomin muodostaminen Gram-Schmidt-proseduurin avulla on työlästä ja monimutkaista. Lisäksi kun solmupolynomi on saatu selville, joudutaan vielä ratkaisemaan sen nollakohdat. Polynomin nollakohtien ratkaiseminen taas on tunnetusti laskennallisesti vaativaa ja siihen liittyvät algoritmit epästabiileja [15].

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

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

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

Rekursiokaavasta (19) päästään suoraan tulokseen, jonka perusteella solmut  $x_i$  ja painot  $w_i$  saadaan laskettua tietyn Jaakobin-matriisin ominaisarvojen ja -vektorien avulla. Numeerisesta lineaarialgebrasta taas tunnetaan tehokkaita ratkaisualgoritmeja (kuten Lanczos-algoritmi) tällaisten ominaisarvo-ongelmien ratkaisemiseksi, joten myös Gaussin kvadratuureja voidaan laskea tehokkaasti, mikäli  $\alpha_k$  ja  $\beta_k$  tunnetaan. [15]

### 3.3.2 Ominaisuuksia

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

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

Taulukko 1: Klassiset ortogonaaliset polynomit

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

2. Kaikki painot  $w_i$  ovat positiivisia, koska

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

mikä tarkoittaa että kaava on numeerisesti stabiili.

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

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

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

saadaan uusi sääntö

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

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

### 3.3.3 Laskeminen

Näiden tietojen perusteella voimme esimerkinomaisesti laskea kolmipisteisen Gaussin kvadratuurin vakiopainofunktiolle  $w(x) = 1$  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 kaikkien polynomien  $p(x) \in \mathbb{P}_2$ . Sisätulon (18) lineaarisuudesta johtuen näin on, mikäli  $\omega_3$  on ortogonaalinen kannan  $\{1, x, x^2\}$  jokaisen monomin kanssa, joten saadaan yhtälöryhmä

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

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

Vaihtoehtoisesti olisimme voineet käyttää hyväksi tietoa, että  $\omega_3 = \frac{1}{l_3}P_3$ , missä  $P_3$  on kolmas Legendren polynomi ja  $l_3$  on  $P_3$ :n kolmannen asteen termin kerroin. Kaavasta (14) nähdään, että jos  $\langle f, g \rangle = 0$  ja  $c \in \mathbb{R}$ , niin myös  $\langle cf, g \rangle = 0$ , eli ortogonaalinen polynomi 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

$$(n+1)P_{n+1} = (2n+1)xP_n - nP_{n-1}, \quad P_0 = 1, \quad P_1 = x, \quad (20)$$

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 [6, s.27].

Painot  $w_i$  voitaisiin laskea kaavasta (11), mutta ne saadaan helpommin käyttämällä hyväksi tietoa, että etsimämme kvadratuuri on tarkka monomeille  $1, x, x^2$ . Näin saadaan toinen yhtälöryhmä painoille  $w_i$ :

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

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

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

. Muuttujanvaihdon  $t = x + 1$  avulla voidaan edellä laskettua kvadratuuria käyttää välillä  $[0, 2]$ , jolloin soveltamalla sitä jo aiemmin tutkimaamme esimerkki-



integrandiin  $f(x) = e^{-x^2}$  ja hyödyntällä integrandin symmetrisyyttä  $y$ -akselin suhteen, saadaan tulokseksi

$$\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx = 2 \int_0^2 e^{-x^2} dx \approx 2G_3(e^{-(x+1)^2}) \approx 1.7577$$

$$2E_{G_3}(e^{-(x+1)^2}) \approx 0.0064.$$

Vastaavasti käyttämällä Simpsonin menetelmää samassa tilanteessa saadaan virheeksi

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

joka on yli 16 kertaa suurempi kuin Gaussin kvadratuurin virhe.

## 4 Kubatuurit

Kaiken kaikkiaan tähän mennessä on havaittu, että numeerinen integrointi yhdessä ulottuvuudessa on hyvin tunnettu ongelma, johon on tarjolla tehokkaita ratkaisuja. Ulottuvuuksissa  $d \geq 2$  tilanne muuttuu ratkaisevasti. Ensinnäkin, yhdessä ulottuvuudessa on integrointisääntöjen kannalta vain yksi rajoitettu integroimisalue, koska kaikki viivasegmentit ovat yhteneviä affiniimuunnoksella. Useammassa ulottuvuudessa erilaisia integroimisalueita (joita ei voi muuntaa toisikseen affiniimuunnoksella) on ääretön määrä. Toiseksi, yhdessä ulottuvuudessa ortogonaalipolynomien teoria on hyvin tunnettu ja siitä on huomattavaa apua kvadratuurien määrittämisessä. Toisin kuin usean muuttujan tapauksessa, jossa ortogonaalipolynomien teoria on huomattavasti monimutkaisempi ja heikommin tunnettu, eikä sen avulla ole onnistuttu muodostamaan kubatuurisääntöjä kuin harvoissa tapauksissa. [14, 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  $\mathbf{x}^\alpha$  äärellinen lineaarikombinaatio

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^n} a_\alpha \mathbf{x}^\alpha \quad (21)$$

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

$$\text{Deg}[p] = d = \max \left\{ \sum_{i=1}^n |\alpha_i| \mid a_\alpha \neq 0 \right\}. \quad (22)$$

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*

$$\hat{\text{Deg}}[p] = \max \left\{ \max \left\{ |\alpha_i| \mid i = 1, \dots, n \right\} \mid a_\alpha \neq 0 \right\} \quad (23)$$

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 [14, 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 jo-

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	$-\infty < x_i < \infty$	$e^{-\sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{x}}}$

ko kehittämään täysin oma kubatuurinsa tai se voidaan yrittää ositella ali-alueisiin, joille kubatuurisäännöt tunnetaan, jonka jälkeen alkuperäistä integraalia voidaan approksimoida ali-alueiden integraalien summana [14, s.14].

## 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  $\Omega_s \subset \mathbb{R}^s$  *kartesinen 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

$$\iint_{\Omega_r \times \Omega_s} w(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_s) f(\mathbf{x}_r, \mathbf{x}_s) d\mathbf{x}_r d\mathbf{x}_s \approx \sum_{\substack{i=1 \\ j=1}}^{\substack{N_r \\ N_s}} w_{s,j} w_{r,i} f(\mathbf{x}_{r,i}, \mathbf{x}_{s,j}) \quad (24)$$

ja sen *yleinen* tarkkuusaste  $d$  on  $\min\{d_r, d_s\}$  [6].

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, eli Newton–Cotes kvadratuurit, voitiin muodostaa helposti integroimalla interpolaatiopolynomia, joka on aina olemassa. Interpolaatiopolynomille ei valitettavasti ole olemassa 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  $p(\mathbf{x}_i) = y_i \forall i$  [6, s.275]. Yleistys on mahdollinen, mikäli annetut pisteet  $\mathbf{x}_i$  muodostavat tulomuotoisen hilan. Näin voidaan muodostaa integrointikaavoja, mutta koska vaadittavien pisteiden määrä kasvaa jälleen eksponentiaalisesti dimension suhteen, ne eivät ole kovin hyödyllisiä [6, s.276].

Yksiulotteisessa tapauksessa huomasimme, että kvadratuuri, joka muodostetaan integroimalla interpolaavaa 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

$$\sum_{k=1}^N w_k f(\mathbf{x}_k)_i = \int_{\Omega} f(\mathbf{x})_i w(\mathbf{x}) \, d\Omega, \quad i = 1, \dots, \dim[\mathbb{P}_d^n] = \binom{n+d}{d}, \quad (25)$$

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 (25) oikealle puolelle laskea numeroarvot (painofunktion kaikkien momenttien tuli olla määritelty). Tarkastellaan esimerkkinä, 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 (25) mukaiseksi systeemiksi saadaan

$$\begin{aligned} w_1 + \dots + w_6 &= 4 \\ w_1 x_1 + \dots + w_6 x_6 &= 0 \\ w_1 y_1 + \dots + w_6 y_6 &= 0 \\ w_1 x_1 y_1 + \dots + w_6 x_6 y_6 &= 0 \\ w_1 x_1^2 + \dots + w_6 x_6^2 &= \frac{4}{3} \\ w_1 y_1^2 + \dots + w_6 y_6^2 &= \frac{4}{3}. \end{aligned} \quad (26)$$

Jos pisteet  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 1, \dots, 6$  tiedetään, (25) 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 (25), ja sitä kautta painot  $w_i$ , on ratkaistavissa [14, s. 54]. Nämä säännöt ovat analogisia yhden ulottuvuuden Newton-Cotes säännöille [14, 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 (25) ei ole ainoastaan ratkaistavissa, vaan vieläpä siten että kaikki painot ovat positiivisia ja kaikki pisteet ovat integrointialueen  $\Omega$  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].

Yksiulotteisissa interpolatorisissa 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 ortogonaaliset polynomit

Ensinnäkin, jokaista astelukua  $d$  kohti on olemassa useampia moniulotteisia polynomeja. 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 kubatuurisääntö 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  $U := \{p \in \mathbb{P}^n \mid p(\mathbf{x}_i) \forall \mathbf{x}_i\}$ . 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 [12].

### 4.3.2 Symmetriasta

Hyödyntämällä Sobolevin *invarianttiteoriaa* [3, s. 17], voidaan yhtälöryhmän (25) 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 (25) 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.

On olennaista huomata, että ratkaisun helpottumista lukuunottamatta ei ole mitään erityistä syytä miksi kubatuurisäännön symmetrian pitäisi olla sama kuin integroimisalueen tai painofunktion. Päin vastoin, 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.

### 4.3.3 Alarajoista

Erittäin olennaista kubatuurisääntöjen löytämiselle on arvio pienimmälle mahdolliselle tukipisteiden määrälle  $N$ . Jotta yhtälöryhmää (25) voitaisiin lähteä ratkaistaan, 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 [5, 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 kubatuuri- ja kubatuuri- välisestä yhteydestä on vain pieni matka erääseen hyvin yleiseen alarajaan. Tarkastellaan ensin  $\mathbb{P}_k^n$ :n dimensiota, jos rajoitutaan pelkästään tietylle integroimisalueelle  $\Omega$ . 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

$$N \geq \dim[\mathbb{P}_{k|\Omega}^n]. \quad (27)$$

Kaavan (27) ongelma on, että useimmissa tapauksissa siihen ei päästä. 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 (27) alaraja on sama tarkkuuasteille  $d = 2k$  ja  $d = 2k + 1$ .

Toinen yleinen alaraja koskee keskipisteensä suhteen symmetrisiä kubatuureja. Niiden tarkkuusaste on pariton ja niitä koskevan alarajan osoitti yleisesti Möller [10]. Olkoon keskipisteensä suhteen symmetrisen kubatuurisäännön tarkkuusaste  $d = 2k + 1$ ,  $k \in \mathbb{N}_0$  ja olkoon  $R_{2k}(R_{2k+1})$  polynomiavaruus, johon kuuluu kaikki  $\mathbb{P}_{2k+1|\Omega}^n$ :n parilliset(parittomat) polynomit. Tällöin pisteiden määrälle  $N$  pätee

$$\begin{aligned} N &\geq 2 \dim[R_k] - 1, & \text{jos } k \text{ on parillinen ja } 0 \text{ on yksi pisteistä} \\ N &\geq 2 \dim[R_k], & \text{muulloin} \end{aligned} \quad (28)$$

#### 4.4 Radonin 7 pisteinen 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 [5, s. 133].

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

$$\begin{aligned} P_0^3 &= x^3 + Q_0, & P_1^3 &= x^2y + Q_1 \\ P_2^3 &= xy^2 + Q_2, & P_3^3 &= y^3 + Q_3 \end{aligned} \quad (29)$$

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  $xK_1 + yK_2 = K_3$  [14, 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  $\alpha, \beta$  ja  $\gamma$  täytyy valita siten, että myös  $K_3$  on kolmannen asteen ortogonaalinen polynomi. 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  $\alpha, \beta$  ja  $\gamma$  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

$$A^2 + B^2 + C^2 > 0, \quad (30)$$

niin parametrit voidaan määrittää skalaarikerrointa vaille. Muutoin parametrit voidaan valita vapaasti. Ehto (30) on selvästikin riippuvainen vain integrointialueesta ja painofunktiosta. Sellainen alue, jolle ehto (30) ei päde on onnistuttu muodostamaan ja tällöin on mahdollista muodostaa kubatuurisääntö jossa on vain 6 pistettä. Yleisille ingreoimisalueille, kuten neliölle ja vakiopainofunktiolle, ehto (30) 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 kubatuuri:

$$\begin{aligned} \int_{C_2} f(x, y) \, dx dy \approx & \frac{8}{7} f(0, 0) + \frac{5}{9} \sum_{i=1}^4 f\left(\pm\sqrt{\frac{1}{3}}, \pm\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \\ & \frac{20}{63} \left(f\left(\sqrt{\frac{14}{15}}, 0\right) + f\left(-\sqrt{\frac{14}{15}}, 0\right)\right) \end{aligned} \quad (31)$$

## 5 Koeasetelma

## 6 Tulokset

## 7 Yhteenveto

## 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, 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.
- [6] P. J. Davis ja P. Rabinowitz: *Methods of numerical integration*. Academic Press, 1975, ISBN 0122063503, 9780122063503.
- [7] W. Gautschi: *Numerical analysis: an introduction*. Springer, 1997, ISBN 0817638954, 9780817638955.
- [8] V. I. Krylov: *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962.
- [9] F. Y. Kuo ja I. Sloan: *Lifting the curse of dimensionality*. Notices of the AMS, 52(11):1320–1328, 2005.
- [10] H. M. Möller: *Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl*. Numerische Mathematik, 25(2):185–200, kes. 1976, ISSN 0029-599X.
- [11] J. Radon: *Zur mechanischen Kubatur*. Monatshefte für Mathematik, 52(4):286–300, jou. 1948, ISSN 0026-9255.
- [12] H. Schmid: *Interpolatorische Kubaturformeln und reelle Ideale*. Mathematische Zeitschrift, 170(3):267–282, elo. 1980, ISSN 1095-9203.
- [13] J. Stoer ja R. Bulirsch: *Introduction to numerical analysis*. Springer, 2 p., 1993.
- [14] A. H. Stroud: *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [15] L. N. Trefethen ja D. Bau: *Numerical linear algebra*. SIAM, 1997, ISBN 0898713617, 9780898713619.
- [16] C. W. Ueberhuber: *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997, ISBN 3540620575, 9783540620570.
- [17] 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.