

Ville Väänänen

## **Numeerinen integrointi: kvadratuureista kubatuureihin**

**Elektroniikan, tietoliikenteen ja automaation tiedekunta**

Kandidaatintyö  
Espoo 10.5.2010

**Vastuupettaja:**

Prof. Markus Turunen

**Työn ohjaaja:**

TkT Simo Särkkä



**Aalto-yliopisto**  
Teknillinen korkeakoulu



# Esipuhe

Espoo 10.5.2010

1cm

# Sisältö

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

# 1 Johdanto

Pinta-alojen ja tilavuuksien määrittäminen on yleisesti kohdattu ongelma matemaatiikan 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 [15]. Näin todennäköisesti onkin mikäli ongelmallinen integraali on määritelty ainoastaan yhdessä ulottuvuudessa. Jos kuitenkin dimensioita on enemmän kuin yksi, jolloin puhutuaan *kubatuureista*, on ongelma, ehkä hieman yllättäen, kaikkea muuta kuin ratkaistu.

Numeerisen integroinnin menetelmät, joihin tässä työssä keskitytään, ovat muotoa

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

jossa  $f$  on *integrandi*,  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  on integroimisalue (yhdessä ulottuvuudessa integroimisväli),  $w(\mathbf{x})$  on *painofunktio*, pisteet  $\{\mathbf{x}_i\} \in \mathbb{R}^n$  ovat *solmut* tai *tukipisteet* ja  $\{w_i\} \in \mathbb{R}$  ovat *painot*. Vuonna 1814 saksalainen matemaatikko Carl Friedrich Gauss julkaisi merkittävän muotoa 1 olevan tuloksensa (tapaukselle  $n = 1$  ja  $w(x) := 1$ ), joka tunnetaan hänen mukaansa nimellä *Gaussin kvadratuuri* [9]. Kyseessä on hyvin elegantti tulos, 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 paperinne, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvystä, jonka olette minulle suoneet”[15]

Valitettavasti Gaussin tulos ei ole suoraan yleistettävissä useampaan ulottuvuuteen. Kuitenkin Vuonna 1877 James Clerk Maxwell esitteli 27-pisteisen, muotoa 1 olevan kubatuuri-säännön ja tätä pidetään ensimmäisenä varsinaisena esimerkkinä kubatuurista sellaisena kuin se tänä päivänä ymmärretään [3]. Useampiulotteisten integraalien likimääräiseen ratkaisemiseen on täysin eri tyyppisiäkin menetelmiä, joista tärkeimpänä mainittakoon erilaiset *Monte-Carlo* menetelmät. Näissä integrandin arvo lasketaan suuressa määrässä satunnaisia pisteitä, jolloin integraalia voidaan approksimoida näiden arvojen keskiarvona. Etuna on, että päästään tyystin irti niin sanotusta *dimensionaalisuuden kirouksesta*, jonka mukaan tarvittavien funktio-evaluaatioiden määrä riippuu eksponentiaalisesti dimensioiden määrästä. Kuitenkin hyväksyttävään tarkkuuteen pääseminen vaatii suurta määrää satunnaispisteitä ja funktio-evaluaatioita jo yhdestä dimensiosta lähtien, mutta jos

dimensioiden määrä lähestyy useita satoja, ovat Monte-Carlo menetelmät silti usein ainoa vaihtoehto. Jatkossa keskitytään ainoastaan kaavan 1 mukaisiin sääntöihin.

Tässä työssä käydään ensin läpi tarvittavat esitiedot, kuten Riemann integraali ja polynominen approksimaatio, jotta voidaan esittää Gaussin kvadratuurien idea. Tämän jälkeen keskitytään integrointiin useammassa kuin yhdessä dimensiossa ja käydään läpi erilaisia keinoja kubatuuri-sääntöjen muodostamiseksi. Teoreettisen selvityksen jälkeen vertaillaan eräitä kiinnostavia menetelmiä keskenään soveltamalla niitä esimerkki-integraaleihin kahdessa dimensioissa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteella tehdään päätelmiä menetelmien soveltuvuudesta erilaisiin tilanteisiin.

[4, 7, 6, 5, 11, 14, 8, 15, 2] [1, 10, 13, 12]

## 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-)integroitava ja integraalia merkitään  $\int_a^b f(x) dx \in \mathbb{R}$ , jota kutsutaan myös *määrätyksi integraaliksi*. Määrätyllä integraalilla ja *integraalifunktiolla*  $F(x)$  (ja sitä kautta derivoinnilla) on läheinen yhteys, joka tunnetaan *analyysin ensimmäisenä peruslauseena*:

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

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

### 2.1 Geometrisen tulkinta

Geometrisesti tarkasteltuna luku  $\int_a^b f(x) dx$  tarkoittaa kuvaajan  $y = f(x)$ ,  $x$ -akselin ja suorien  $x = a$  ja  $x = b$  rajaamaa pinta-alaa. Tämä on suora seuraus Riemann-integraalin määritelmästä. Olkoon  $P_n = \{a = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = b\}$  välin  $[a, b]$   $n$ -välinen jako,  $m_i = \inf\{f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1}\}$  funktion  $f(x)$  suurin alaraja ja  $M_i = \sup\{f(x) : x_i \leq x \leq x_{i+1}\}$  vastaavasti pienin yläraja välillä  $[x_i, x_{i+1}]$ . Jakoa  $P_i$  kutsutaan  $P_j$ :n *tihentymäksi* mikäli  $P_i \subset P_j$  ja merkitään  $|P_i|$  jaon  $P_i$  pisintä jakoväliä. Tällöin Riemann-integraali voidaan määritellä *ala-*

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

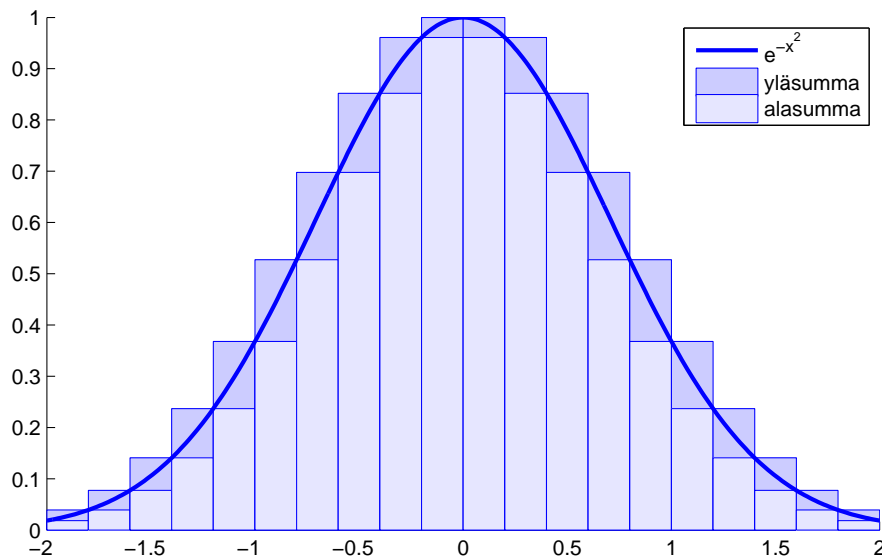
ja *yläsummien*

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

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

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

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



Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

### 3 Numeerisia menetelmiä

Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakulmio-menetelmä* [15]. Kuvan 1 esittämässä tapauksessa saadaan  $L_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.57$  ja  $U_{P_{20}}(e^{-x^2}) \approx 1.96$ , todellisen arvon ollessa  $\int_{-2}^2 e^{-x^2} dx \approx 1.76$ . Tulosta voidaan hiukan parantaa valitsemalla suorakulmion  $i$  korkeudeksi  $f(\frac{x_i+x_{i+1}}{2})$ .

Selkeä parannus saadaan aikaiseksi *puolisuunnikasmenetelmällä*, jossa myös käytetään tasavälistä jakoa  $P_n = \{x_i \mid x_i = a + hi\}$ , mutta suorakulmiot on korvattu puolisuunnikkailla:

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

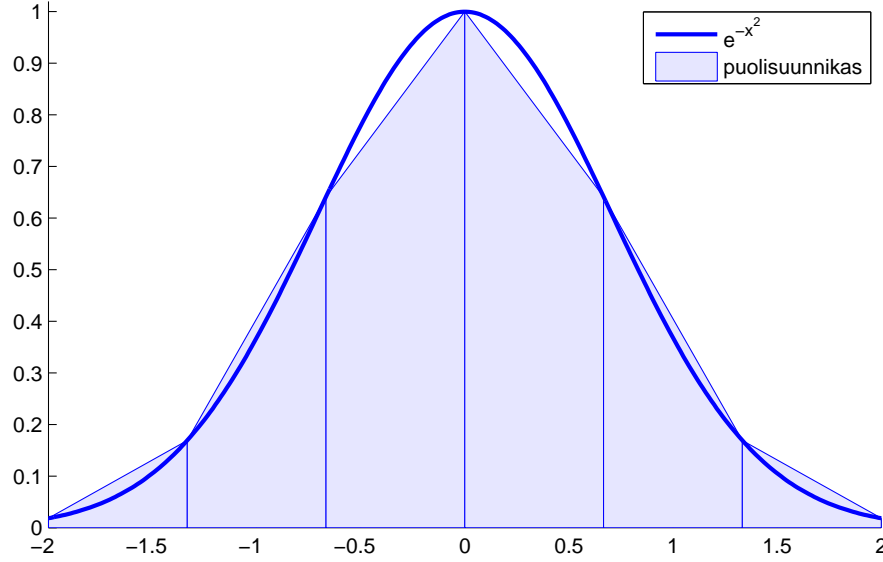
Puolisuunnikasmenetelmää on havainnollistettu kuvassa 2.[9]

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.[9]

#### 3.1 Polynomiapproksimaatio

Yleinen *approksimaatio-ongelma* voidaan muotoilla seuraavasti: olkoon  $f$  approksimoitava funktio ja  $\|\cdot\|$  normi joka on määritelty funktioavaruuden  $\Phi$  funktioille  $\varphi$ .





Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

Etsi  $\hat{\varphi} \in \Phi$  siten että

$$\|f - \hat{\varphi}\| \leq \|f - \varphi\| \quad \forall \varphi \in \Phi. [9] \quad (5)$$

Tässä työssä esiintyville funktioille on määritelty sisätulo  $\langle \cdot, \cdot \rangle : \Phi \times \Phi \rightarrow \mathbb{R}$  jatkuvassa tapauksessa alueessa  $[a, b]$  painofunktion  $w$  suhteen

$$\langle f, g \rangle_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x) \, dx \quad (6)$$

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

$$\langle f, g \rangle_w = \sum_a^b f(x_i)g(x_i)w_i. \quad (7)$$

Tällöin sisätulon indusoima normi on

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}. \quad (8)$$

Jos approksimaatioalue on diskreetti ja parhaalle approksimaatiolle  $\hat{\varphi}$  pätee  $\|f - \hat{\varphi}\|$ , niin silloin  $\hat{\varphi}(t_i) = f(t_i) \quad \forall i = 1, \dots, N$  ja sanotaan että  $\hat{\varphi}$  *interpoloi* funktiota  $f$  pisteissä  $t_i$ . [9]

Polynomit ovat yleisimmin käytettyjä approksimointifunktioita ja ylivoimaisesti suurin osa numeerisista integroimismenetelmistä perustuu integrandin approksimointiin polynomilla [8]. 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 [8][9].

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 *yhdistelmämenetelmäksi* (eng. *compound* tai *composite*) [8]. Jos integrointiväli on jaettu osaväleihin, seuraavassa tarkastelussa keskitytään ainoastaan yhteen osaväliin (joka sisältää  $n + 1$  pistettä).

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

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

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

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. Kaavassa 9 pisteitä  $x_i$  kutsutaan *solmuiksi* tai *tukipisteiksi* ja kertoimia  $w_i$  *painoiksi*. [9]

Havaitaan, että mikäli kaavassa 9 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: [9]

$$\int_{x_k}^{x_{k+2}} f(x) \, dx \approx \frac{h}{3} (f(x_k) + 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2}))$$

$$\implies \int_a^b f(x) \, dx \approx \frac{h}{3} (f(a) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 4f(x_{n-1}) + f(b))$$

Virheen  $E_n(p)$  pienentämiseksi voidaan nähdä kaksi eri lähestymistapaa: joko käytetään pienen tarkkuusasteen Newton-Cotes kaavaa aina vain lyhyemmillä osaväleillä tai käytetään pidempiä osavälejä mutta suurta tarkkuusastetta. Ensimmäisessä tapauksessa evaluointipisteiden määrä kasvaa nopeasti epäkäytännöllisen suureksi. Kuitenkin sekä puolisuunnikasmenetelmä että Simpsonin menetelmä ovat erittäin laajalti käytettyjä ja voidaan näyttää, että kun osavälien määrä  $N \rightarrow \infty$  niin  $E_n(p) \rightarrow 0$  kaikille integrointivälillä jatkuville funktioille. Toisessa tapauksessa  $n : n$  kasvaessa suureksi, voivat painot  $w_i$  olla joko positiivisia tai negatiivisia ja absoluuttiselta arvoltaan milivaltaisen suuria, jolloin nämä menetelmät eivät enää ole numeerisessa mielessä stabiileja. Tämän vuoksi korkean tarkkuusasteen Newton-Cotes menetelmiä ei juurikaan käytetä. [11]

Sanotaan että muotoa 9 olevan kvadratuurin *tarkkuusaste* on  $d$ , jos se antaa tarkan tuloksen kaikille polynomeille, jotka ovat korkeintaan astetta  $d$ , eli  $E_n(p) = 0$ , jos  $\text{Deg}(p) \leq d$ , mutta ei yhdellekään polynomille jonka  $\text{Deg}(p) > d$ . Koska Newton-Cotes menetelmissä integrandia interpoloidaan  $n + 1$ :ssä pisteessä astetta  $n$  olevalla polynomilla, niin  $d_{NC} = n - 1$  ja Newton-Cotes kaavoja kutsutaan *interpolatorisiksi*. Tästä seuraa luonnollisesti kysymys, onko tarkkuusastetta mahdollista parantaa interpolatorista paremmaksi? Mikäli solmupisteet  $x_i$  ovat ennalta määrätty, on interpolatorinen tarkkuusaste paras mahdollinen, mutta jos solmupisteet voidaan valita vapaasti, voidaan tarkkuusastetta parantaa.

### 3.3 Gaussin kvadratuuri

Jatkossa keskitytään muotoa

$$\int_a^b f(x)w(x) \, dx = \sum_{i=1}^n f(x_i)w_i + E_n(f) \quad (11)$$

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

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

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

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

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

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 11 mukaisen kvadratuurin 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

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

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

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

mutta

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

joten sääntö ei ole tarkka polynomeille astetta  $2n$  [11].

Keskitytään nyt tarkastelemaan ehtoa 14. Sanotaan että  $f$  ja  $g$  ovat *ortogonaaliset*  $w$ :n suhteen, jos

$$\langle f, g \rangle_w = 0. \quad (18)$$

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

Näiden tietojen perusteella voimme esimerkinomaisesti laskea kolmipisteisen Gauszin 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  $\omega_3$ :n täytyy olla ortogonaalinen monomeja  $1, x, x^2$  vastaan, 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  $x_0 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, x_1 = 0, x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}$ . Painot  $w_i$  voitaisiin laskea kaavasta 10, mutta ne saadaan helpommin käyttämällä

hyväksi tietoa, että etsimämme kvadratuuri on tarkka mm. monomeille  $1, x, x^2$ . Näin saadaan toinen yhtälöryhmä painoille  $w_i$ :

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

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

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

. Transformaation  $t = x + 1$  avulla voidaan edellä laskettua kvadratuuria käyttää välillä  $[0, 2]$ , jolloin soveltamalla sitä jo aiemmin tutkimaamme esimerkki-integrandiin  $f(x) = e^{-x^2}$  ja hyödyntällä integrandin symmetrisyyttä  $y$ -akselin suhteen, saadaan tulokseksi

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

Vastaavasti käyttämällä Simpsonin menetelmää samassa tilanteessa saadaan virheeksi

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

joka on yli 16 kertaa suurempi kuin Gaussin kvadratuurin virhe.

### 3.3.1 Ortogonaalisista polynomeista

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

## 4 Kubatuurit

### 4.1 Tulosäännöt

### 4.2 Integroimisalueet

### 4.3 Kubatuurisääntöjä

#### 4.3.1 Gauss-Hermite

## 5 Koeasetelma

## 6 Tulokset

## 7 Yhteenveto

## Viitteet

- [1] I. Arasaratnam and S. Haykin. Cubature Kalman Filters. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 54(6):1254–1269, kesäkuuta 2009.
- [2] W. Cheney and D. Kincaid. *Numerical mathematics and computing*. Cengage Learning, 6 edition, 2007.
- [3] R. Cools. Constructing cubature formulae: the science behind the art. *Acta Numerica*, 6:1, marraskuuta 1997.
- [4] R. Cools. Advances in multidimensional integration. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 149(1):1–12, 2002.
- [5] R. Cools. The state of the art of constructing cubature formulas for multivariate integrals. *FEMTEC 2006*, page 4, 2006.
- [6] R. Cools, D. Huybrechs, and D. Nuyens. Recent topics in numerical integration. *International Journal of Quantum Chemistry*, 109(8):1748–1755, 2009.
- [7] 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.
- [8] P. J. Davis and P. Rabinowitz. *Methods of numerical integration*. Academic Press, 1975.
- [9] W. Gautschi. *Numerical analysis: an introduction*. Springer, 1997.
- [10] A. Hinrichs and E. Novak. CUBATURE FORMULAS FOR SYMMETRIC MEASURES IN HIGHER DIMENSIONS WITH FEW POINTS. *Mathematics of computation*, 76(259):1357–1372, 2007.
- [11] V. I. Krylov. *Approximate calculation of integrals*. Macmillan, 1962.
- [12] E. Novak and K. Ritter. Simple Cubature Formulas with High Polynomial Exactness. *Constructive approximation*, 15(4), 1999.
- [13] I. Omelyan and V. Solovyan. Improved cubature formulae of high degrees of exactness for the square. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 188(2):190–204, 2006.
- [14] A. H. Stroud. *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.
- [15] C. W. Ueberhuber. *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997.