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

Aalto-yliopisto
Teknillinen korkeakoulu

Esipuhe

Espoo 10.5.2010

1cm

Sisältö

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 arkkitehdeistä tilastotieteilijöihin tarvitsevat työssään tarkkoja ja tehokkaita keinoja integraalien määrittämiseen, sillä niitä joudutaan laskemaan esimerkiksi paljon käytetyssä elementtimenetelmässä sekä Bayes-mallinnuksen yhteydessä [18, 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 transkendenttisten funktioiden avulla [14]. 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 [17]. Näin todennäköisesti onkin mikäli ongelmallinen integraali on määritelty 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

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

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 $n \geq 2$, $w(\boldsymbol{x})$ on *painofunktio*, pisteet $\{\boldsymbol{x}_i\} \in \mathbb{R}^n$ 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 paperinne, en enää voinut pidättäytyä kiittämästä teitä siitä mielihyvästä, jonka olette minulle suoneet”[17]

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 [12].

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 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 esimerkikisi 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 dimensioissa. Saatujen tulosten ja esitellyn teorian perusteellä 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 $f(\boldsymbol{x})$ on jatkuva (lukuunottamatta äärellistä määrää epäjatkuvuuspisteitä) ja rajoitettu integroimisalueessa $[a, b]$, on sille määritelty Riemann-integraali, jota merkitään $\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x \in \mathbb{R}$ ja jota kutsutaan myös *määrätyksi integraaliksi*. Määrätyllä integraalilla ja *integraalifunktiolla* $F(x)$ (ja sitä kautta derivoinnilla) on läheinen yhteys, joka tunnetaan *analyysin ensimmäisenä peruslauseena*:

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \int_a^b F'(x)\ \mathrm{d}x = F(b) - F(a) \tag{2}$$

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 $\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x$ 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

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

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 $\lim_{k\to\infty} |P_k| = 0$. Nyt jos mikä tahansa näin muodostettu Riemann–summien sarja suppenee *yhteiseen* raja-arvoon S, eli $\lim_{k\to\infty} S_k = S$, niin

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = S. \tag{3}$$

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

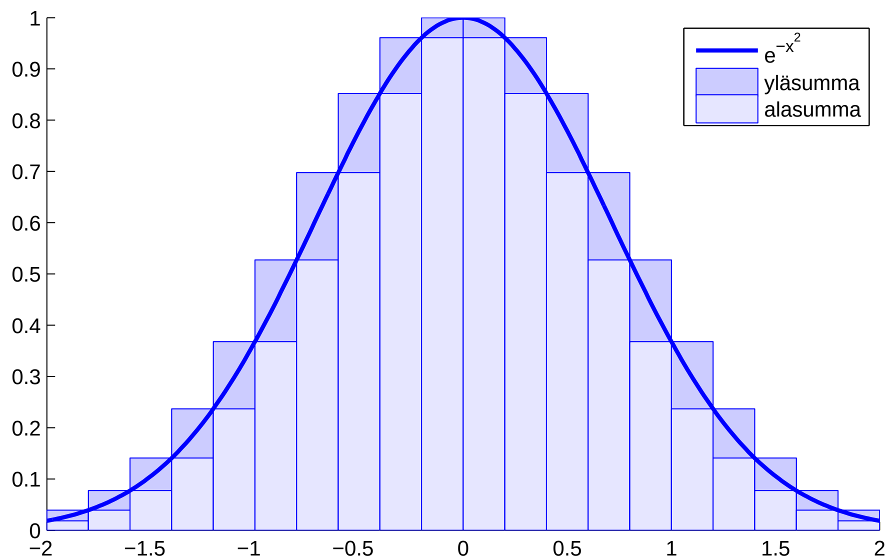
$$\int_a^\infty f(x)\ \mathrm{d}x = \lim_{r\to\infty} \int_a^r f(x)\ \mathrm{d}x,$$

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

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

$$\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x = \lim_{r\to a^+} \int_r^b f(x)\ \mathrm{d}x.$$

Kuten jo kaavasta (1) voidaan päätellä, usein yksinkertaisen integraalin $\int_a^b f(x)\ \mathrm{d}x$ sijaan on kohdataan *painotettuja* integraaleja $\int_a^b f(x)w(x)\ \mathrm{d}x$. 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 $\int_{\mathbb{R}} w(x)\ \mathrm{d}x = 1$, painofunktiota kutsutaan jakaumaksi ja $\int_a^b f(x)w(x)\ \mathrm{d}x$ on tällöin painotettu keskiarvo.



Kuva 1: Ala- ja yläsummat 20-välisellä jaolla

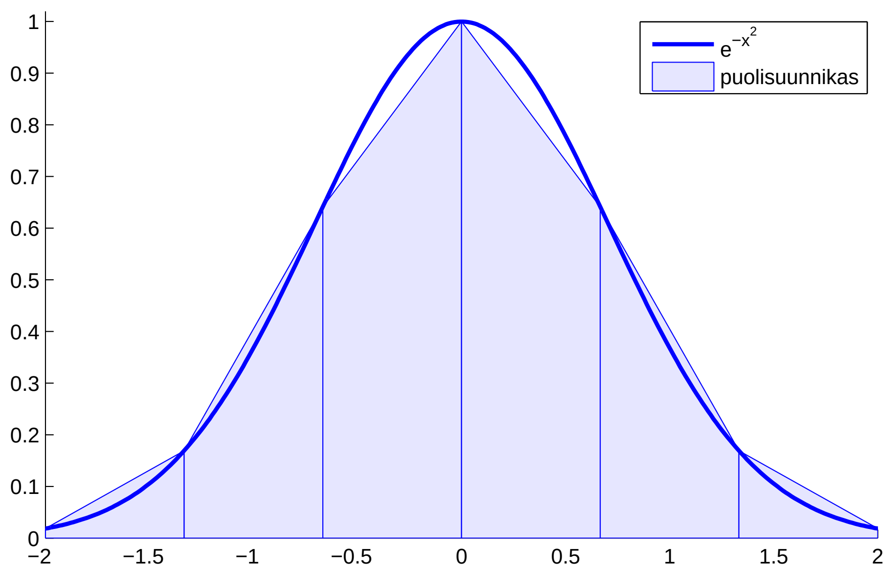
3 Kvadratuurit

Käyttämällä tasavälistä jakoa, edellä esitellyistä ala- tai yläsummista saadaan suoraan eräs, melkoisen epätarkka, numeerinen integraaliapproksimaatio, *suorakaidemenetelmä* [17]. 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 $\int_{-2}^{2} e^{-x^2}\ \mathrm{d}x \approx 1.76$. 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:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{h}{2}\left(f(x_k) + f(x_{k+1})\right) \tag{4}$$

Puolisuunnikasmenetelmää on havainnollistettu kuvassa 2.[7]



Kuva 2: Puolisuunnikasmenetelmä

Sekä suorakulmiomenetelmä, että puolisuunnikasmenetelmä voidaan tulkita siten, että integrandia approksimoidaan jokaisella välillä vakiofunktiolla (0:nnen 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, Φ funktioille φ. Etsi $\hat{\varphi} \in \Phi$ siten että

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

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 integroituva), normi

$$\|f(t)\|_{2,w} = \sqrt{\int_a^b w(t)|f(t)|^2\,\mathrm{d}t}, \tag{6}$$

jolloin puhutaan *pienimmän neliösumman* menetelmästä. Diskreetissä tapauksessa

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

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

Polynomit $p(x) = a_m x^m + \cdots + a_1 x + a_0 = \sum_{i=0}^{m} a_i x^i$, 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 $\mathrm{Deg}(p) \leq m$. 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* ℓ_i avulla:

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

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

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 $\mathrm{Deg}(\ell_i) = n$, niin myös $\mathrm{Deg}(p) = n$.

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

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x + E_n(p) &= \int_a^b \sum_{i=0}^{n} \ell_i(x) f(x_i)\,\mathrm{d}x + E_n(p) \\
&= \sum_{i=0}^{n} \left(f(x_i) \int_a^b \ell_i(x)\,\mathrm{d}x \right) + E_n(p) \\
&= \sum_{i=0}^{n} f(x_{k+i}) w_i + E_n(p) \qquad (8) \\
w_i &= \int_a^b \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^{n} \left(\frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right) \mathrm{d}x. \qquad (9)
\end{aligned}$$

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]

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

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 $N \to \infty$ niin $E_n(p) \to 0$ kaikille integrointivälillä jatkuville funktioille. Toisessa tapauksessa $n : n$ kasvaessa suureksi, voivat painot w_i olla joko positiivisia tai negatiivisiä 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 $\mathrm{Deg}(p) \leq d$, mutta ei yhdellekään polynomille jonka $\mathrm{Deg}(p) \geq d+1$. 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 määrätyt, on interpolatorinen tarkkuusaste paras mahdollinen, mutta jos solmupisteet voidaan valita vapaasti, voidaan tarkkuusatetta parantaa.

3.3 Gaussin kvadratuuri

Tarkastellaan nyt kaavan (1) mukaista integroimissääntöä yhdessä ulottuvuudessa

$$\int_a^b f(x)w(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i + E_n(f). \tag{10}$$

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

$$w_i = \int_a^b w(x)\ell_i(x)\,\mathrm{d}x \tag{11}$$

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 μ_s

$$\mu_s = \int_a^b t^s\,\mathrm{d}w(t), \forall s \in \mathbb{N} \tag{12}$$

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*

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

Nyt jos ja vain jos solmupolynomille pätee

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

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

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

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

$$\int_a^b p(x)w(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b r(x)w(x)\,\mathrm{d}x. \tag{16}$$

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

$$\int_a^b q(x)\omega_n(x)w(x)\,\mathrm{d}x = 0, \tag{17}$$

kun taas

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

joten

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

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 $w(x) \geq 0$)

$$\int_a^b \omega_n^2(x)w(x)\,\mathrm{d}x > 0,$$

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

$$\int_a^b f(x)g(x)w(x)\,\mathrm{d}x = 0, \tag{18}$$

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

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

ja *ortonormaali* mikäli lisäksi pätee

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

.

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 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 [7, s.65]. Näin jokaista, edellä mainitut ehdot täyttävää, painofunktiota kohti on olemassa oma ortogonaalisten polynomien joukkonsa $\pi_{j,w}$ (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 laskennalliseti vaativaa ja siihen liittyvät algoritmit epästabiileja [16].

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

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

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 α_k ja β_k tunnetaan.[16]

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

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

   mikä tarkoittaa että kaava on numeerisesti stabiili.

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

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 (affiinimuunnos)

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

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 $[-1, 1]$:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} f(x) \, \mathrm{d}x \approx & w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) \\ \omega_3 = & (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) = x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0. \end{aligned}$$

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 ω_3 on ortogonaalinen kannan $\{1, x, x^2\}$ jokaisen monomin kanssa, joten saadaan yhtälöryhmä

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

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

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

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:

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \int_{-2}^{2} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x = 2\int_{0}^{2} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \approx 2G_3(e^{-(x+1)^2}) &\approx 1.7577 \\ 2E_{G_3}(e^{-(x+1)^2}) &\approx 0.0064. \end{aligned}$$

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.

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 affiinimuunnokella. 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. Toisin kuin usean muuttujan tapauksessa, jossa ortogonaalipolynomien teoria on huomattavasti monimutkaisempi ja heikommin tunnettu, eikä sen avulla ole onnistuttu muodostamaan kubatuurisääntöjä kuin harvoissa tapauksissa. [15, s.6-7]

Olkoon $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_n) \in \mathbb{N}^n$ ja $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}} = \prod_{i=1}^{n} x_i^{\alpha_i}$. Monen n:n muuttujan polynomi $p(\boldsymbol{x}) \in \mathbb{P}_d^n$ on monomien $\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{\alpha}}$ äärellinen lineaarikombinaatio

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

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

$$\mathrm{Deg}[p] = d = \max\left\{ \sum_{i=1}^{n} |\alpha_i| \;\middle|\; a_{\boldsymbol{\alpha}} \neq 0 \right\}. \tag{22}$$

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*

$$\widehat{\mathrm{Deg}}[p] = \max\left\{ \max\left\{ |\alpha_i| \;\middle|\; i = 1, \ldots, n \right\} \;\middle|\; a_{\boldsymbol{\alpha}} \neq 0 \right\} \tag{23}$$

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 $\mathrm{Deg}[p(x,y)] = \max\{3+4, 5+0\} = 7$ ja $\widehat{\mathrm{Deg}}[p(x,y)] = \max\{\max\{3,4\}, \max\{5,0\}\} = \max\{4,5\} = 5$. Tämä tarkoittaa myös, että jos $\mathbb{P}_1 = \{p \mid \mathrm{Deg}[p] \leq d\}$ ja $\mathbb{P}_2 = \{p \mid \widehat{\mathrm{Deg}}[p] \leq d\}$, 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 [15, 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 [15, s.14].

Taulukko 2: Yleisimmät integroimisalueet

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

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 $\Omega_s \subset \mathbb{R}^s$ *karteesinen tulo*, eli

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

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

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

jonka tarkkuusaste on d_r sekä

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

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

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

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 $\{\boldsymbol{x}_i \mid i = 1, \ldots, N\ \boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^n\}$ ja niitä vastaavat arvot $\{y_i \mid i = 1, \ldots, N\ y_i \in \mathbb{R}\}$, ei välttämättä voida muodostaa polynomia $p(\boldsymbol{x})$ jolle pätisi $p(\boldsymbol{x}_i) = y_i\ \forall i$ [6, s.275]. Yleistys on mahdollinen, mikäli annetut pisteet $\boldsymbol{x_i}$ muodostavat tulomuotoisen hilan. Näin voidaan muodostaa integrointikaavojakin, 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 interpoloivaa polynomia, on sama kuin se, joka saadaan jos vaaditaan että integraalin on oltava tarkka valitun polynomiavaruuden $\mathbb{P}^1_d$ kannalle. Tämä idea voidaan yleistää myös moniulotteiseen tapaukseen. Vaaditaan siis nyt, että kubatuurin on oltava tarkka kaikille $\{f_i\}$, $span\{f_i\} = \mathbb{P}^n_d$. Saadaan epälineaarinen yhtälöryhmä

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

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 (painofunkion kaikkien momenttien tuli olla määritelty). Tarkastellaan esimerkkiä, 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

$$\begin{aligned}
&w_1 + \cdots + w_6 &&= 4 \\
&w_1x_1 + \cdots + w_6x_6 &&= 0 \\
&w_1y_1 + \cdots + w_6y_6 &&= 0 \\
&w_1x_1y_1 + \cdots + w_6x_6y_6 &&= 0 \\
&w_1x_1^2 + \cdots + w_6x_6^2 &&= \tfrac{4}{3} \\
&w_1y_1^2 + \cdots + w_6y_6^2 &&= \tfrac{4}{3}.
\end{aligned} \tag{26}$$

Jos pisteet (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, 6$ tiedetään, (25) on lineaarinen kuuden yhtälön yhtälöryhmä, jossa muuttujina ovat painot $\{w_1, \ldots, w_6\}$. Jos myös pisteitä pidetään muuttujina, on kyseessä epälineaarinen yhtälöryhmä kahdeksantoista muuttujan $\{x_1, \ldots, x_6, y_1, \ldots, y_6, w_1, \ldots, w_6\}$ suhteen.

Yleisesti ottaen, jokainen piste $\boldsymbol{x}_k$ tuo yhtälöryhmään $n+1$ muuttujaa: koordinaatit $x_{1,k}, \ldots, x_{n,k}$ 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 $\boldsymbol{x}_i$ siten, että yhtälöryhmä (25), ja sitä kautta painot w_i, on ratkaistavissa [15, s. 54]. Nämä säännöt ovat analogisia yhden ulottuvuuden Newton-Cotes säännöille [15, s. 54]. Voidaan itse asiassa osoittaa vielä paljon enemmänkin. Niin sanotun Tchakaloffin teoreeman mukaan jos $N \leq \dim[\mathbb{P}_d^n]$ ja $w(\boldsymbol{x}) > 0\ \forall \boldsymbol{x} \in \Omega$, niin yhtälöryhmä (25) 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 $\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N$ 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 kubatuurisäännön olemassaololle, jonka tarkkkuusaste 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, $\{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N\} \subset \mathbb{C}^n$ ja $U := \{p \in \mathbb{P}^n \mid p(\boldsymbol{x_i}) \forall \boldsymbol{x}_i\}$. 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 [13].

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

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

jossa $s_i \in \{-1, 1\}$ ja $\{p_1, \ldots, p_n\}$ on mikä tahansa indeksien $1, \ldots, n$ permutaatio [1, 3]. Lisäksi kaikilla näin saaduilla pisteillä $\boldsymbol{a}$ ja $\boldsymbol{b}$ on oltava samat painot.

On olennaista huomata, että ratkaisun helpottumista lukuunottamatta ei oe mitään erityistä syytä miksi kubatuurisäännön symmetrian pitäsi olla sama kuin integroimiaslueen 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 neliölle (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 ratkaisemaan, olisi N:lle saatava jokin arvio, mieluiten tietysti pienin mahdollinen [3, s. 27]. Myös edellä esitellyn polynomisen ideaalin kannan löytäminen on vahvasti riippuvainen $N : st$ [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 kubatuurien välisestä yhteydestä on vain pieni matka erääseen hyvin yleiseen alarajaan. Tarkastellaan ensin $\mathbb{P}_k^n$:n dimensiota, jos rajoitutaan pelkästään tietylle integroimiasalueelle Ω. Jos alue on esimerkiksi n-pallon pinta $\Omega = \{\boldsymbol{x} \mid \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1\}$, niin kaikki $\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 1\right)^p,\ p \in \mathbb{N}$ ovat yhteneväisiä vakiopolynomin 1 kanssa ja merkitään

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

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

$$N \geq \dim[\mathbb{P}^n_{k|\Omega}]. \tag{27}$$

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 $\mathbb{P}^n_{2k+1|\Omega}$:n parilliset(parittomat) polynomit. Tällöin pisteiden määrälle N pätee

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

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 ≤ 2. Tällöin saadaan kolmannen asteen ortogonaalisten polynomien kanta

$$\begin{array}{rclrcl} P_0^3 &=& x^3 + Q_0, & P_1^3 &=& x^2y + Q_1 \\ P_2^3 &=& xy^2 + Q_2, & P_3^3 &=& y^3 + Q_3 \end{array} \tag{29}$$

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 $xK_1 + yK_2 = K_3$ [15, s. 103]. Kahdelle ensimmäiselle saadaan saadaan edellä esitellyn kannan avulla muodot

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

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

$$\begin{array}{rcl} A & = & \int_\Omega (P_0^3 P_2^3 - P_1^3 P_1^3)\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ B & = & \int_\Omega (P_0^3 P_3^3 - P_1^3 P_2^3)\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y \\ C & = & \int_\Omega (P_1^3 P_3^3 - P_2^3 P_2^3)\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y, \end{array}$$

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

$$A^2 + B^2 + C^2 > 0, \tag{30}$$

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 esitellyt yhtälöt saadaan kubatuuri:

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

5 Koeasetelma

Valittujen työssä esiteltyjen menetelmien suorituskykyä arvioidaan kahden koetilanteen avulla. Ensimmäisessä koetilanteessa keskitytään approksimoimaan kahden muuttujan funktion integraalia

$$I_1[f(x, y)] = \int_{S_2} f(x, y)\ \mathrm{d}x\mathrm{d}y. \tag{32}$$

Integrandeina käytetään funktioita

$$F_1(x, y) = e^{-\frac{1}{2(1-0.7^2)}\left(x^2+y^2-2*0.7*xy\right)}$$
$$F_2(x, y) = \sqrt{|xy|},$$

joita on havainnollistettu kuvassa 3. 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 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 näiden epäjatkuvuuskohtien yli ei tarvitsisi integroida lainkaan. Nyt on kuitenkin pyritty konstruoimaan kubatuurien kannalta haastava tilanne ja integraalia ei jaeta osiin.

Ensimmäisen koetilanteen kubatuureiksi valitaan seuraavat menetelmät:

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

Q_{3^2}:n yleinen tarkkuusaste on 5, kuten myös Q_7:n tarkkuusaste. Q_{68}:n tarkkuusaste on 19 ja se on johdettu aiemmin esiteltyä invarianttimenetelmää käyttäen [11]. Sen tukipisteiden määrä on myös pienin tunnettu sarjassaan.

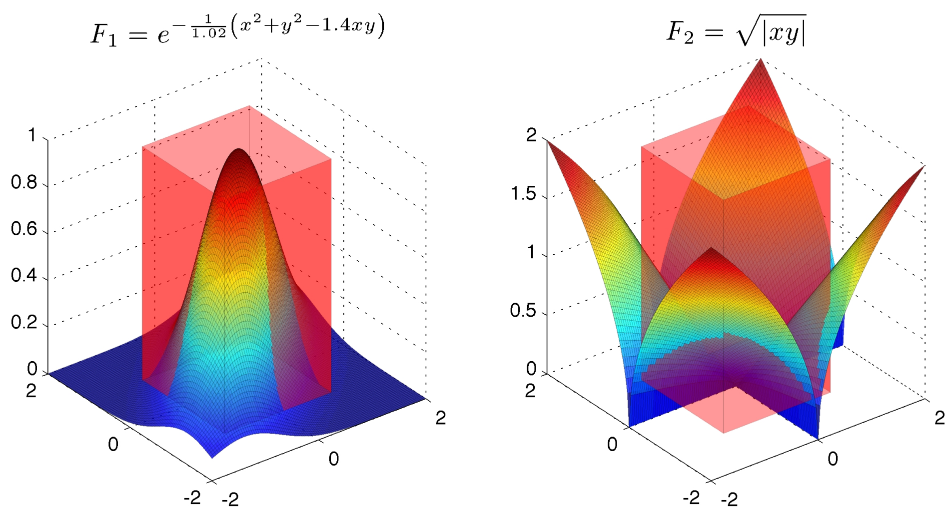
Taulukossa 3 on esitetty ensimmäisen koetilanteen tulokset. Siihen lisäksi laskettu absoluuttinen virhe, joka on saatu vertaamalla kubatuurin tulosta oikeaan tulokseen. Ensimmäisen integrandin tapauksessa on hyödynnetty MATLAB:in *mvncdf* funktiota, jonka avulla oikean tuloksen voi laskea mielivaltaisella tarkkuudella. Toiselle integrandille taas on käytetty MATLAB:in funktiota *dblquad*, joka myös kykenee tarjoamaan virhearvion.

Taulukko 3: Ensimmäisen koetilanteen tulokset

	$Q[F_1]$	$E[F_1]$	$Q[F_2]$	$E[F_2]$
Q_{3^2}	2.40428	0.3%	0.95629	34.3%
Q_7	2.46015	2.6%	1.48609	12.2%
Q_{68}	2.39773	0.0%	1.74004	1.6%

6 Tulokset

7 Yhteenveto



Kuva 3: Ensimmäisen koetilanteen testifunktioiden kuvaajat. Integroimisaluetta $[-1, 1]^2$ on pyritty havainnollistamaan läpinäkyvällä suorakulmaisella särmiöllä. Integraalin arvo on särmiön ja funktion kuvaajan rajaama tilavuus.

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] 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.

[12] J. Radon: *Zur mechanischen Kubatur*. Monatshefte für Mathematik, 52(4):286–300, jou. 1948, ISSN 0026-9255.

[13] H. Schmid: *Interpolatorische Kubaturformeln und reelle Ideale*. Mathematische Zeitschrift, 170(3):267–282, elo. 1980, ISSN 1095-9203.

[14] J. Stoer ja R. Bulirsch: *Introduction to numerical analysis*. Springer, 2 p., 1993.

[15] A. H. Stroud: *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall, 1971.

[16] L. N. Trefethen ja D. Bau: *Numerical linear algebra*. SIAM, 1997, ISBN 0898713617, 9780898713619.

[17] C. W. Ueberhuber: *Numerical computation: methods, software, and analysis, Volume 2*. Springer, 1997, ISBN 3540620575, 9783540620570.

[18] 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.