

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

TÖBBVÁLTOZÓS FÜGGVÉNYEK
INTEGRÁLÁSA TÉGLÁKON ÉS
SZIMPLEXEKEN

Szakdolgozat

Írta: Horváth Norbert
Matematika BSc szak

Témavezetők:

Simon L. Péter, egyetemi docens
Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék
Eötvös Lorand Tudományegyetem, Természettudományi Kar

Horváth Tamás, egyetemi tanársegéd
Matematika és Számítástudomány Tanszék
Széchenyi István Egyetem, Műszaki Tudományi Kar

Budapest, 2010

Tartalomjegyzék

Köszönetnyilvánítás	1
1. Numerikus integrálás egy dimenzióban	2
1.1. Az numerikus integrálás alapfeladata	3
1.2. Konvergenciatételek	4
1.3. Interpolációs kvadratúrák	5
1.3.1. Newton-Cotes-formulák	6
1.4.1. Gauss kvadratúra	10
2. Numerikus integrálás több dimenzióban	14
2.1. Szorzatszabály	15
2.4. Integrálás szimplexeken	18
2.4.1. Integrációs tartomány transzformálása	18
2.4.2. Tükrözéssel módszer	19
2.5.1. Dunaván pontok	20
2.6.1. Newton-Cotes-formula két dimenzióban	25
2.6.2. Három dimenzió	28
2.7. Összehasonlítás	29
3. Peremértékfeladatok gyenge megoldása véges elem módszerrel	32
3.1. Az alapprobléma és annak elméleti hátttere egy dimenzióban	32
3.2. Megvalósítás	36
3.4. Az alapprobléma és annak elméleti hátttere két dimenzióban	38
3.5. Megvalósítás	39

<i>TARTALOMJEGYZÉK</i>	iii
Összegzés	43
Irodalomjegyzék	45
Nyilatkozat	46

Ábrák jegyzéke

1.1. \sin függvény közelítése	10
2.1. Kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjai $n = 4$ és $n = 5$ esetén	27
3.1. Kalapfüggvény	37
3.2. Bázisfüggvény két dimenzióban	40
3.3. Φ formafüggvény a $[0,1] \times [0,1]$ tartományon	42

Táblázatok jegyzéke

1.1. Néhány alacsony rendű zárt Newton-Cotes-formula	9
1.2. \sin függvény integráljának közelítése $[0, \frac{11\pi}{6}]$ intervallumon	9
1.3. Gauss-Legendre kvadratura formula súlyai és alappontjai	12
2.1. Dunavant alappontjai és súlyai ötödrendig	24
2.2. Közelítő integrálás Dunavant pontokkal	24
2.3. Alappontok és súlyok tetraéderen történő integrálásnál	30
2.4. Alappontok száma különböző pontosság mellett	30

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőimnek, Horváth Tamásnak és Simon L. Péternek a téma feldolgozása során nyújtott segítséget. A vázlatok alapos áttekintésével, számtalan hasznos tanáccsal segítették munkám. Köszönetemet szeretném kifejezni még csoporttársaimnak, akik az évek során inspiráló közeget biztosítottak a matematika szerteágazó területeinek megismeréséhez.

1. fejezet

Numerikus integrálás egy dimenzióban

A terület- és térfogatszámítás, így az integrálás a matematika legrégebbi alkalmazásai közé tartozik. Számos alkalmazott tudományág igényli integrálok kiszámítását, dolgozatomban tárgyát tekintve a differenciálegyenletek megoldásainak meghatározásában játszott szerepe emelendő ki.

Numerikus integrálás¹ alatt algoritmusok egy olyan családját és azok alkalmazását értjük, mellyel határozott integrálok numerikus értékét számíthatjuk ki. Számos integrál esetében ez analitikusan is elvégezhető, azonban léteznek olyan esetek is, amikor a primitív függvény nem írható fel elemi függvényekkel². Előfordulhat az is, hogy ugyan szimbolikusan fel tudjuk írni a primitív függvényt, de gyakorlati alkalmazásokhoz célszerűbb annak inkább egy numerikus közelítését megadni. Ez a helyzet például akkor, ha az antiderivált egy végtelen sor formájában adott. Numerikus integrálást használunk akkor is, ha az integrandus csak bizonyos pontokban ismert (például minták esetén).

A következőkben az egydimenziós esetet tekintem át, hiszen a később tárgyalásra kerülő többdimenziós numerikus integrálás ennek általánosításaként adódik.

¹ Az egydimenziós numerikus integrálásra általában a *kvadratúra*, a kettő vagy több dimenzióra pedig a *kubatúra* illetve kvadratúra terminusok egyaránt használatosak.

² Példa erre az $f(x) = e^{-x^2}$ függvény.

1.1. Az numerikus integrálás alapfeladata

Az egydimenziós numerikus integrálás alapfeladata az

$$I(f) := \int_a^b f(x) dx \quad (1.1)$$

határozott integrál kiszámítása, ahol feltesszük, hogy $f \in C[a, b]$.

1.1.1. Definíció (Alappontok). Az $F_n = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ halmaz elemeit alappontoknak nevezzük, ha minden x_i -re ($i = 0, \dots, n$) teljesül, hogy $a \leq x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_n \leq b$, ahol $[a, b]$ a fenti zárt intervallum.

Tekinthetjük úgy a problémát, hogy az alappontokban mérési eredményekkel rendelkezünk, vagy feltehetjük azt is, hogy a függvényértéket tetszőleges helyen meghatározhatjuk, de csak $n + 1$ darab ilyen kiértékelésünk lehet. A későbbiekben ez utóbbit fogjuk követni.

Az integrálás Riemann-féle értelmezéséből kiindulva a fenti lineáris funkcionál f helyen felvett értékét a következő alakkal közelíthetjük:

$$Q_n(f) := \sum_{i=0}^n w_i f(x_i), \quad (1.2)$$

ahol a w_i számokat (amelyek most nem függenek az x_i alappontoktól) *súlyoknak*, magát az $Q_n : C[a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ funkcionált pedig *kvadratúra képletnek* vagy *kvadratúra formulának* nevezzük. Azért célszerű így eljárni, mert az iménti kvadratúra képlet egy Riemann-féle integrálközelítő összeg: $[a, b]$ -nek az alappontokra tett feltevések miatt vehetjük egy olyan $P = \{[y_0, y_1], [y_1, y_2], \dots, [y_n, y_{n+1}]\}$ partícióját, amelyre $a = y_0$ és $b = y_{n+1}$, valamint $x_i \in [y_i, y_{i+1}]$, ekkor a $w_i = y_{i+1} - y_i$ definícióval Q_n valóban egy Riemann-féle integrálközelítő összeg. Az ilyen típusú összeg azonban az alappontok számának növelésével tetszőlegesen megközelíti az eredeti integrált, hiszen fennáll

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\sum_{i=0}^n w_i f(x_i) \right),$$

ahol $\delta := \max_i(w_i)$.

A következő részben olyan tételket ismertetek, amelyekkel ez a konvergencia vizsgálható és a kvadratúra képlet hibája becsülhető.

1.2. Konvergenciatételek

A következő tétel és annak következményei adják majd az később vizsgálandó kvadratúra képletek konstrukciójának alapját.

1.2.1. Tétel. Minden $f \in C[a, b]$ esetén

$$Q_n(f) \rightarrow I(f), \quad n \rightarrow \infty,$$

pontosan akkor igaz, ha a következő két feltétel teljesül:

1) $Q_n(p) \rightarrow I(p)$ minden $p \in \mathcal{P}$ és $n \rightarrow \infty$ esetén (ahol \mathcal{P} a polinomok osztályát jelöli)

2) Q_n normája egyenletesen korlátos, vagyis létezik C konstans, hogy

$$\|Q_n\| \leq C \quad \text{minden } n\text{-re és } f \in C[a, b]\text{-re.}$$

Az (1.2)-ben definiált lineáris funkcionál normája most $\|Q_n\| = \sum_{i=0}^n |w_i|$, ugyanis

$$|Q_n(f)| \leq \sum_{i=0}^n |w_i| \max_i |f(x_i)| \leq \sum_{i=0}^n |w_i| \|f\|_\infty,$$

ahol például az $(x_i, \text{sgn}(w_i))$ pontokat interpoláló elsőfokú spline függvényen érvényes az egyenlőség.

Ezt felhasználva nézzük a 1.2.1 Tétel néhány következményét:

1.2.2. Tétel (Pólya). Ha Q_n egyenletesen korlátos, vagyis $\|Q_n\| = \sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| \leq C \quad \forall n \in \mathbb{N}$ és $Q_n(p) = I(p) \quad \forall p \in \mathcal{P}_n$ (\mathcal{P}_n jelöli a legfeljebb n -edfokú polinomok osztályát), akkor $Q_n \rightarrow I \quad \forall f \in C[a, b]$ -re.

1.2.3. Következmény (Sztyeklov). Legyen $w_i^{(n)} \geq 0 \quad \forall i \forall n$ -re, és teljesüljön $Q_n(p) = I(p) \quad \forall p \in \mathcal{P}_n$ -re. Ekkor $Q_n \rightarrow I \quad \forall f \in C[a, b]$ -re.

Bizonyítás. Mivel

$$\|Q_n\| = \sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| = \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} = \int_a^b 1 \, dx = b - a,$$

ahol a 3. egyenlőség azért áll fenn, mert Q_n pontos a $p \equiv 1 \in \mathcal{P}_n$ polinom. \square

1.3. Interpolációs kvadratúrák

Az előbbi tételek mutatják, miért érdemes polinomokat vizsgálni a kvadratúra formulák esetében: az 1.2.2 Tétel miatt ha Q_n pontos minden legfeljebb n -edfokú polinomra, és ha a súlyok összegére teljesül $\sum_{i=0}^n |w_i^{(n)}| \leq C$ valamilyen C konstansra, akkor n növelésével a kvadratúra formulánk konvergál az integrál értékéhez. Az így kapott kvadratúra képletet nevezzük *interpolációs kvadratúra formulának*.

Interpoláljuk tehát f -et valamilyen p polinommal, melynek integrálját már explicit módon meg tudjuk határozni. Mivel feltevésünk szerint alappontokkal és a hozzájuk tartozó függvényértékekkel rendelkezünk, ezért kézenfekvő a Lagrange-féle interpolációs polinomok (L_n) alkalmazása:

$$L_n(x_i) = \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x),$$

ahol $l_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_k}{x_i - x_k}$. Erre a polinomra nyilvánvalóan teljesül, hogy minden x_i helyen az adott függvényértéket veszi fel, ráadásul ezen feltételekkel ez az egyetlen \mathcal{P}_n -beli megoldás (lásd Gisbert és Galina (2002), Dahlquist és Björck (2008)).

Ekkor

$$f(x) = L_n(x) + R_n(x),$$

ahol R_n a maradéktag. Integrálva $[a, b]$ -n az előbbit kapjuk

$$\begin{aligned} I(f) &:= \int_a^b f(x) dx = \int_a^b L_n(x) dx + \int_a^b R_n(x) dx = \\ &= \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x) dx + \int_a^b R_n(x) dx =: \sum_{i=0}^n f(x_i) w_i + E_n, \end{aligned} \quad (1.3)$$

ahol az utolsó egyenlőség első tagja adja a megfelelő interpolációs kvadratúra képletet. Mivel a Lagrange-féle interpolációs polinom hibáját ismerjük, így annak $[a, b]$ -n történő integrálásával az előbbi kvadratúra formula approximációs hibája is könnyen számítható:

$$E_n(f) := I(f) - Q_n(f) = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x)) \prod_{k=0}^n (x - x_k) dx \quad (1.4)$$

Az integrál tulajdonságait felhasználva ebből az approximációs hibára

$$|E_n(f)| \leq \frac{\|f^{(n+1)}\|_\infty}{(n+1)!} \int_a^b \prod_{k=0}^n (x - x_k) dx \quad (1.5)$$

adódik.

A kvadratúra formulák egyik meghatározó jellemzője, hogy legfeljebb hányadfokú polinomokra pontosak. Ezt a *renddel* adjuk meg:

1.3.1. Definíció (Kvadratúra formula rendje). *Azt mondjuk, hogy egy kvadratúra képlet rendje d , ha $Q_n(p) = I(p) \quad \forall p \in \mathcal{P}_d$ -re, de létezik olyan $d+1$ -edfokú polinom, amelyre az egyenlőség nem teljesül.*

Interpolációs kvadratúra formulák esetén a rend és az alappontok száma nem független egymástól, amit a következő tétel fogalmaz meg:

1.3.2. Tétel. *Legyenek adottak az x_0, x_1, \dots, x_n alappontok. Ekkor az 1.3-ben megadott interpolációs kvadratúra formula rendje legalább n . Fordítva is igaz, ha egy kvadratúra formula rendje legalább n , akkor az interpolációs.*

1.3.1. Newton-Cotes-formulák

Ha az (1.3)-ban megkonstruált kvadratúra képletet ekvidisztáns alappontokra alkalmazzuk ($x_i = a + i\frac{b-a}{n}, i = 0, \dots, n$), akkor az ún. *Newton-Cotes interpolációs kvadratúra formuláról* beszélünk. A végpontok figyelembevételére alapján két típusát különböztetjük meg:

- **Zárt:** az alappontok $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots \leq x_n = b$, míg a lépésköz $h = \frac{b-a}{n}$
- **Nyílt:** $a = x_{-1} < x_0 < x_1 \dots \leq x_n < x_{n+1} = b$, ahol x_{-1} és x_{n+1} nem interpolációs alappontok, azonban a lépésközre teljesül, hogy $h = x_0 - x_{-1}$ és $h = x_{n+1} - x_n$, vagyis $h = \frac{b-a}{n+2}$

Az (1.3)-ban jelzett w_i együtthatókat zárt formulák esetén a következőképpen írhatjuk fel ($i = 0, \dots, n$):

$$w_i = \int_a^b l_i(x) dx = \int_a^b \frac{(x-x_0) \dots (x-x_{i-1})(x-x_{i+1}) \dots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \dots (x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1}) \dots (x_i-x_n)} dx = \quad (1.6)$$

$$= \int_0^n \frac{t(t-1) \dots (t-i+1)(t-i-1) \dots (t-n)h^n}{h(h-1) \dots 1(-1)(-2) \dots (-(n-i))h^n} h dt = \quad (1.7)$$

$$= \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_0^n \frac{t(t-1) \dots (t-n)}{t-i} dt =: (b-a)B_{i,n}^z, \quad (1.8)$$

ahol $h = \frac{b-a}{n}$ és $t = \frac{x-a}{h}$. A nyílt formulákra ugyanígy, $h = \frac{b-a}{n+2}$ felhasználásával adódik:

$$w_i = \int_a^b l_i(x) dx = \frac{b-a}{n+2} \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_0^{n+2} \frac{(t-1)(t-2)\dots(t-n-1)}{t-i-1} dt \quad (1.9)$$

$$=: (b-a)B_{i,n}^{ny}. \quad (1.10)$$

Az együtthatók így meghatározott alakjai a következő, numerikus számításoknál jól használható tulajdonságokkal bírnak:

1.3.3. Állítás. *A zárt és nyílt Newton-Cotes formulák együtthatóira igazak a következők:*

$$1. \sum_{i=0}^n B_{i,n} = 1$$

$$2. B_{i,n} = B_{n-i,n}$$

Bizonyítás. Felhasználva, hogy a kvadratúra formula pontos az 1 polinomra:

$$b-a = \int_a^b 1 dx = \sum_{i=0}^n w_i 1 = \sum_{i=0}^n (b-a)B_{i,n},$$

ahonnan $a-b$ -vel történő leosztás után adódik az állítás első része. A második részt zárt formulák esetére igazolja a következő:

$$\begin{aligned} B_{n-i,n}^z &= \frac{(-1)^i}{n!(n-i)!i!} \int_0^n \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i} dt = \\ &= \frac{(-1)^i(-1)^{n+2}}{n!(n-i)!i!} \int_0^n \frac{(\tau-n)(\tau-n+1)\dots\tau}{\tau-i} d\tau = B_{i,n}^z, \end{aligned}$$

ahol $\tau = n-t$. Hasonlóan adódik nyílt formulákra is. \square

Az előbbi állítás első része a numerikus számítások ellenőrzésekor hasznos, a második rész szerint pedig elég az együtthatók felét kiszámítani.

Vizsgáljuk most meg a Newton-Cotes-formulák rendjét és hibáját. A rendre vonatkozóan igaz a következő állítás:

1.3.4. Állítás. *A Newton-Cotes-formulák páros n -re ($n+1$ darab alappontot feltételezve) pontosak a legfeljebb $n+1$ -edfokú, páratlan n -re pedig a legfeljebb n -edfokú polinomokra.*

Bizonyítás. A 1.3.2 tétel szerint a módszer tetszőleges n esetén pontos a legfeljebb n -edfokú polinomokra. Legyen n páros. Az ekvidisztáns alappontok feltételezése miatt teljesül, hogy $x_i + x_{n-i} = a + b$. Legyen $g(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$. Ekkor

$$\begin{aligned} g\left(\frac{a+b}{2} - x\right) &= \prod_{i=0}^n \left(\frac{a+b}{2} - x - x_i\right) = \prod_{i=0}^n \left(\frac{a+b}{2} - x - (a+b - x_{n-i})\right) = \\ &= \prod_{i=0}^n \left(-\frac{a+b}{2} - x + x_{n-i}\right) = (-1)^{n+1} \prod_{i=0}^n \left(\frac{a+b}{2} + x - x_{n-i}\right) = \\ &= -g\left(\frac{a+b}{2} + x\right), \end{aligned}$$

vagyis g páratlan az $[a, b]$ intervallumon, így $\int_a^b g(x) dx = 0 = \sum_{i=0}^n w_i g(x_i)$, hiszen g definíciója miatt $g(x_i) = 0$ ($i = 0, \dots, n$). Mivel az interpolációs formula pontos minden, legfeljebb n -edfokú polinomra, valamint az előbbi g -re is, így a linearitást felhasználva tetszőleges $n + 1$ -edfokú polinomra is teljesül a pontosság. \square

A nyílt, illetve a zárt Newton-Cotes-formulák hibáját adja meg a következő két tétel (A. Quarteroni et al., 2000):

1.3.5. Tétel. *Páros n esetén a Newton-Cotes-formula hibája:*

$$E_n(f) = \frac{M_n}{(n+2)!} h^{n+3} f^{(n+2)}(\eta)$$

tetszőleges $f \in C^{(n+2)}[a, b]$ -re és $a < \eta < b$ -ra, ahol

$$M_n = \begin{cases} \int_0^n t \pi_{n+1}(t) dt < 0 & \text{zárt formulákra} \\ \int_{-1}^{n+1} t \pi_{n+1}(t) dt > 0 & \text{nyílt formulákra} \end{cases}$$

és $\pi_{n+1}(t) = \prod_{i=0}^n (t - i)$.

1.3.6. Tétel. *Páratlan n esetén a Newton-Cotes-formula hibája:*

$$E_n(f) = \frac{M_n}{(n+1)!} h^{n+2} f^{(n+1)}(\eta)$$

tetszőleges $f \in C^{(n+1)}[a, b]$ -re és $a < \eta < b$ -ra, ahol

$$M_n = \begin{cases} \int_0^n \pi_{n+1}(t) dt < 0 & \text{zárt formulákra} \\ \int_{-1}^{n+1} \pi_{n+1}(t) dt > 0 & \text{nyílt formulákra} \end{cases}$$

és $\pi_{n+1}(t) = \prod_{i=0}^n (t - i)$.

A következő táblázat az együttthatókat, a rendet és a hibát figyelembe véve foglalja össze a legfontosabb példákat ilyen típusú formulákra (az egyszerűség kedvéért f_i -vel jelöltem $f(x_i)$ -t, ahol $x_i = a + i(b - a)/n$).

1.1. táblázat. Néhány alacsony rendű zárt Newton-Cotes-formula

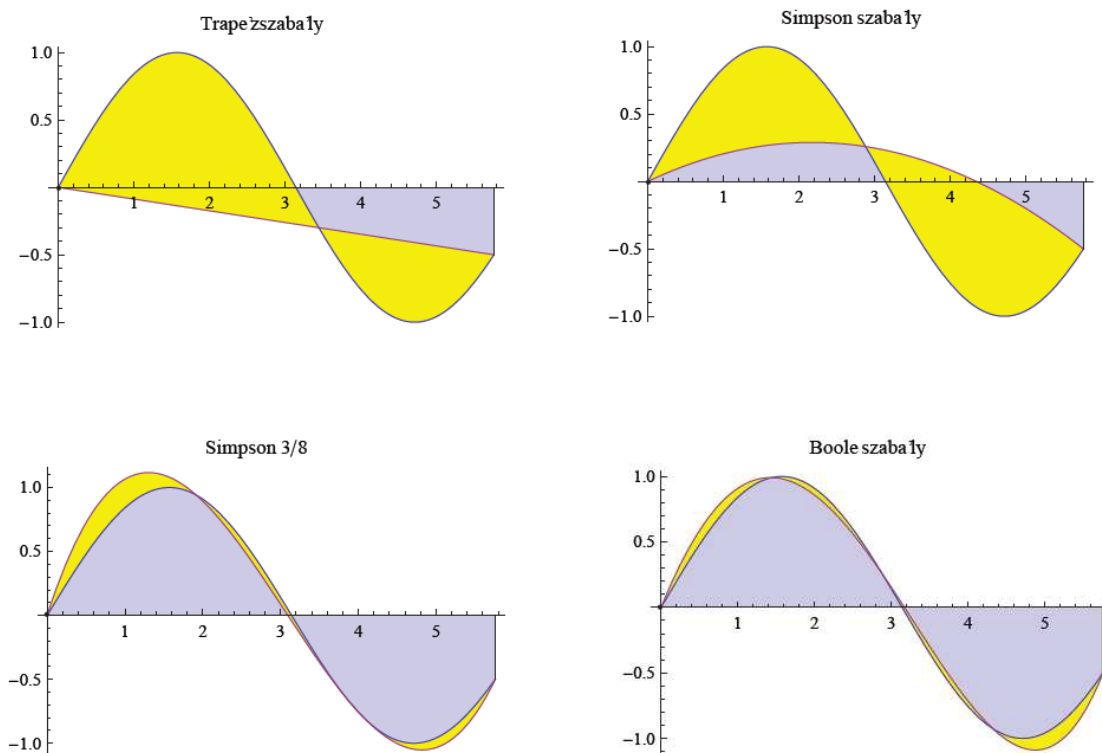
Elnevezés	Rend	Formula	Hiba
Trapézsabály	1	$\frac{b-a}{2}(f_0 + f_1)$	$-\frac{(b-a)^3}{12} f^{(2)}(\xi)$
Simpson szabály	2	$\frac{b-a}{6}(f_0 + 4f_1 + f_2)$	$-\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$
Simpson 3/8	3	$\frac{b-a}{8}(f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$	$-\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi)$
Boole szabály	4	$\frac{b-a}{90}(7f_0 + 32f_1 + 12f_2 + 32f_3 + 7f_4)$	$-\frac{(b-a)^7}{1935360} f^{(6)}(\xi)$

1.4. Példa. Tekintsük példának a \sin függvényt a $[0, \frac{11\pi}{6}]$ intervallumon. Elemi úton adódik, hogy ennek az integrálja $1 - \frac{\sqrt{3}}{2} \approx 0.133975$. Az egyes zárt formulákkal a következő adódik:

1.2. táblázat. \sin függvény integráljának közelítése $[0, \frac{11\pi}{6}]$ intervallumon

Formula	Közelítő érték	Hiba	Relatív hiba (%)
Trapézsabály	-1.439935	1.573875	1174.8
Simpson szabály	0.513828	0.379854	283.5
Simpson 3/8	0.281295	0.14732	109.9
Boole szabály	0.113139	0.020835	15.6
Elméleti érték	0.133975		

A \sin függvény különböző kvadratúra formulák segítségével történő közelítéseit ábrázolja az 1.1 ábra. A sárgával jelölt terület az approximáció hibáját jelöli. A táblázatból és az ábrából is nyilvánvaló az egyes kvadratúra formulák pontosság tekintetében tapasztalt jelentős eltérése.

1.1. ábra. \sin függvény közelítése

1.4.1. Gauss kvadratúra

Természetesnek mutatkozó igény, hogy rögzített számú alappont esetén minél pontosabb eredményt kapjunk, ezt pedig kellően sima integrandus esetén a magasabbrendű kvadratúra formulák biztosíthatják.

Tudjuk, hogy $n+1$ alappont esetén a súlyok megfelelő megválasztásával a Newton-Cotes-formulák páros és páratlan n -re is pontosá tehető a legfeljebb n -edfokú polinomokra. Azonban, ha feloldjuk az ekvidisztáns alappontok feltételezését, akkor újabb $n+1$ szabadságfokot nyerünk, amely felhasználható a rend növelésére.

Általánosítsuk (1.1)-et egy $\alpha : [a, b] \rightarrow [0, \infty]$ súlyfüggvény hozzávételével (a korábbiakban hallgatólagosan azt feltételeztük, hogy $\alpha \equiv 1$), vagyis alapfeladatunk az

$$I(f) := \int_a^b f(x)\alpha(x) dx.$$

integrál közelítése. Az

$$I(f) := \int_a^b f(x)\alpha(x) dx \approx \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x)\alpha(x) dx =: \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) =: G_n(f)$$

által definiált formulát *Gauss kvadratúra formulának* nevezzük.

A következő tételből megtudhatjuk, hogy bizonyos feltétel mellett ez a kvadratúra formula pontos minden legfeljebb $2n + 1$ -edfokú polinomra³.

1.4.1. Tétel. Az

$$\int_a^b f(x)\alpha(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$$

pontos minden $f \in \mathcal{P}_{2n+1}$ -re akkor és csak akkor, ha

$$0 = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) p(x) \alpha(x) dx =: \int_a^b s_n(x) p(x) \alpha(x) dx$$

minden $p \in \mathcal{P}_n$, azaz $\langle s_n, p \rangle_\alpha = 0$ minden $p \in \mathcal{P}_n$ esetén.

Bizonyítás. Vegyünk egy tetszőleges $p \in \mathcal{P}_n$ -t. Ekkor az integrandusban lévő $s_n(x)p(x) \in \mathcal{P}_{2n+1}$. De a feltétel miatt a kvadratúra formula erre a polinomra pontos lesz, vagyis

$$\int_a^b f(x)\alpha(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i s_n(x_i) p(x_i) = 0$$

ahol a második tag azért 0, mert s_n -nek a definíciója miatt minden x_i gyöke. A szükségesség belátásához vegyünk egy tetszőleges $f \in \mathcal{P}_{2n+1}$ -t. Ekkor léteznek olyan $q, r \in \mathcal{P}_n$, hogy f -et polinomiálisan osztva s_n -nel $f(x) = s_n(x)q(x) + r(x)$. Ezt az α súlyfüggvénnyel szorozva és $[a, b]$ -n integrálva

$$\int_a^b f(x)\alpha(x) dx = \int_a^b s_n(x)q(x)\alpha(x) dx + \int_a^b r(x)\alpha(x) dx$$

A jobb oldalon az első tag a feltétel miatt 0. Ekkor

$$\int_a^b f(x)\alpha(x) dx = \int_a^b r(x)\alpha(x) dx = \sum_{i=0}^n w_i r(x_i) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i),$$

ahol a második egyenlőségénél kihasználtuk, hogy a kvadratúra formula pontos minden legfeljebb n -edfokú polinomra ($r \in \mathcal{P}_n$), a harmadik egyenlőségénél pedig azt, hogy az alappontokban s_n a definíciója miatt 0, és a polinomiális osztás miatt ekkor $f(x_k) = r(x_k)$ teljesül. \square

³ A szakirodalomban gyakorta ugyanezt $2n - 1$ -re mondják ki, mindez azonban az alappontok számának eltéréséből fakad: az eddigiekben végig $n + 1$ darab alappontot feltételeztem, amit az előbbibe helyettesítve $2(n + 1) - 1 = 2n + 1$ látható az ekvivalencia.

1.3. táblázat. Gauss-Legendre kvadratúra formula súlyai és alappontjai

Rend	Alappontok	Súlyok
3	± 0.57735026	1.00000000
5	0.00000000	0.88888889
	± 0.77459667	0.55555555
7	± 0.33998104	0.65214515
	± 0.86113631	0.34785485
9	0.00000000	0.56888889
	± 0.53846931	0.47862867
	± 0.90617985	0.23692689
11	± 0.23861918	0.46791393
	± 0.66120939	0.36076157
	± 0.93246951	0.17132449

Vagyis a fenti kvadratúra képlet pontos minden legfeljebb $2n+1$ -edfokú polinomra. Azonban ha vesszük az $f(x) = (p_{n+1}(x))^2$ függvényt, akkor erre nyilván $I(f) > 0$ és $\sum_{i=0}^n w_i f(x_i) = 0$ is teljesül, ami mutatja, hogy $2n+2$ -edfokú polinomokra már nem pontos a kvadratúra formulánk, vagyis a rendje $2n+1$.

A fenti tételből látszik, hogy $s_n(x)$ a fent definiált skalárszorzatra nézve ortogonális minden $p \in \mathcal{P}_n$ -re, vagyis ezen ortogonális polinomok zérushelyei alkotják majd a megválasztandó alappontokat.

Az egyes súlyok meghatározására $\alpha \equiv 1$ esetben explicit képletünk van:

$$w_i = \frac{2}{(1-x_i^2)(P'_n(x_i))^2},$$

ahol P_n az n -edfokú Legendre-polinom. A következő táblázat a Gauss-Legendre kvadratúra formula (vagyis amikor a súlyfüggvény 1) súlyait és alappontjait adja meg a $[-1,1]$ intervallumon véve az integrál közelítését:

A következő fejezetben ezen kvadratúra formulák magasabb dimenziós általánosításával foglalkozom. Látni fogjuk, hogy az integrációs tartomány megváltozása jelentősen befolyásolja formuláink érvényességét.

2. fejezet

Numerikus integrálás több dimenzióban

A különböző alkalmazásokban megjelenő problémák nagy részében többdimenziós numerikus integrálásra van szükség, ami azonban nem pusztán kiterjesztése az egy dimenziós esetnek. Egy dimenzióban bármely véges intervallum egy affin transzformációval az $[-1,1]$ intervallumba képezhető. Tehát a kvadratúra formulákat elég ezen intervallumra meghatároznunk. Mivel az affin transzformációk nem változtatják meg a polinomok fokát, ezért a kvadratúra képlet rendje is megőrződik. d dimenzióban az integrációs tartomány határa $d - 1$ dimenziós. Azonban bármely $d \geq 2$ dimenzió esetén végtelen sok olyan összefüggő tartomány létezik \mathbb{R}^d -ben, amit affin transzformációkkal nem lehet egymásra képezni. Így ezeken – a dimenzió egyezése ellenére – a kvadratúra formulák különbözőek lesznek.

Másrészt a megadott approximációs rend eléréséhez szükséges kiértékelések száma exponenciálisan növekszik a dimenzió nagyságával: ha egy dimenzióban n pontra van szükségünk, akkor d dimenzióban n^d darab pont kell.

Legyen $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ zárt, korlátos tartomány. Ekkor (1.1)-t általánosítva a magasabb dimenziós numerikus integrálás alapfeladata az

$$I(f) := \int_{\Omega} f = \int_{a_d}^{b_d} \int_{a_{d-1}(x_d)}^{b_{d-1}(x_d)} \cdots \int_{a_1(x_2, \dots, x_d)}^{b_1(x_2, \dots, x_d)} f(x_1, x_2, \dots, x_d) dx_1 dx_2 \dots dx_d$$

lineáris funkcionál meghatározása.

2.1. Szorzatszabály

Az egyik lehetőség a fenti alapfeladat megoldására az ún. *szorzatszabály* alkalmazása. A jelölések egyszerűsítése érdekében a kétdimenziós esetet tekintem, magasabb dimenzióra értelemszerűen általánosítható.

Írjuk át az integrált a következő alakra:

$$\int_{\Omega} f \, dx dy = \int_a^b \int_{a(x)}^{b(x)} f(x, y) \, dy dx =: \int_a^b g(x) \, dx$$

Az így kapott integrált közelítsük az előző fejezetben bemutatott $Q_m(F) = \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} F(\xi_i^{(m)}) \approx \int_{-1}^1 F(\xi) \, d\xi$ alakú, $m + 1$ pontú egydimenziós kvadratúra képlettel. Felhasználva, hogy $x_i^{(m)} := \frac{(b-a)\xi_i^{(m)} + (a+b)}{2}$,

$$\int_a^b g(x) \, dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} g(x_i^{(m)}) \approx Q_{m,n}(f), \quad (2.1)$$

majd a g közelítésére újra alkalmazva a kvadratúra képletünket kapjuk

$$Q_{m,n}(f) := \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \frac{d_i - c_i}{2} \sum_{j=0}^n w_j^{(n)} f(x_i^{(m)}, y_j^{(n)}), \quad (2.2)$$

ahol $c_i := c(x_i^{(m)})$, $d_i := d(x_i^{(m)})$, $y_j^{(n)} := \frac{(d_i - c_i)\xi_j^{(n)} + (c_i + d_i)}{2}$. Ha a tartományunk egy téglalap, akkor képletünk a

$$Q_{m,n}(f) := \frac{|A|}{4} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n w_i^{(m)} w_j^{(n)} f(x_i^{(m)}, y_j^{(n)})$$

alakra egyszerűsödik le, ahol $|A| := (b-a)(d-c)$. Az így kapott formulát nevezzük *tenzorszorzat integrációs képletnek*.

Megjegyzendő, hogy amennyiben $[-1,1] \times [-1,1]$ -en integrálunk, akkor $Q_{m,n}$ -nek az f helyen felvett értéke az egydimenziós esetben már látott formára egyszerűsödik:

$$Q_{m,n}(f) := \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n w_i w_j f(x_i^{(m)}, y_j^{(n)}) \quad (2.3)$$

A következő tétel a szorzatszabály approximációs hibáját jellemzi, következménye pedig a formula rendjét határozza meg.

2.1.1. Tétel (Tenzorszorzat integráció hibája). *Legyenek a fenti egydimenziós kvadratúra képlet súlyai nemnegatívak, rendje legalább 1. Legyen f elegendően sima, hogy*

érvényes legyen:

$$\begin{aligned} \left| \int_a^b f(x, y) dx - Q_{mx}(y, f) \right| &= \epsilon_{mx}(y) \leq (b-a)\epsilon_m \quad c \leq y \leq d, \\ \left| \int_c^d f(x, y) dy - Q_{ny}(x, f) \right| &= \epsilon_{ny}(x) \leq (d-c)\epsilon_n \quad a \leq x \leq b, \end{aligned}$$

ahol Q_{mx} , illetve Q_{ny} az (2.1) első egyenlősége után következő tagot jelöli, vagyis egydimenziós kvadratúra formulák, ϵ_m és ϵ_n pedig tetszőleges pozitív valós számok. Ekkor (2.3)-ra teljesül, hogy

$$|I(f) - Q_{m,n}(f)| \leq |A|(\epsilon_m + \epsilon_n).$$

Bizonyítás. Tudjuk, hogy

$$I(f) - Q_{m,n}(f) = I(f) - \int_c^d f(x, y) dy + (b-a) \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \int_c^d f(x_i^{(m)}, y) dy - Q_{m,n}(f), \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} |I(f) - I_{m,n}(f)| &\leq \int_c^d \left| \int_a^b f(x, y) dx - Q_{mx}(y, f) \right| dy + \\ &+ (b-a) \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \left| \int_c^d f(x_i^{(m)}, y) dy - Q_{ny}(x_i^{(m)}, f) \right| \\ &\leq \int_c^d \epsilon_{mx}(y) dy + (b-a) \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \epsilon_{ny}(x_i^{(m)}) \\ &\leq |A| \left(\epsilon_m + \epsilon_n \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \right) = |A|(\epsilon_m + \epsilon_n), \end{aligned}$$

ahol az utolsó egyenlőségénél azt használtuk fel, hogy a vizsgált egydimenziós kvadratúra formula rendje legalább 1, vagyis teljesül $\sum_{i=0}^m w_i^{(m)} = 1$.

□

2.1.2. Következmény. Ha a Q_m , illetve a Q_n képletek x -ben r -edfokú, y -ban s -edfokú polinomokat integrálnak pontosan, akkor a $Q_{m,n}$ kvadratúra képlet olyan polinomokat integrál pontosan, amelyek x -ben maximálisan r , y -ban pedig s -edfokúak.

Tudjuk, hogy az affin transzformációk nem változtatják meg a kvadratúra formula rendjét, így az integrációs tartománynak nem kell feltétlenül téglalaprúknak lennie, paralelogrammán ugyanolyan rendű pontossággal tudunk approximálni.

2.2. Példa. Tekintsük a következő integrált:

$$\int_{-2}^2 \int_{-2}^2 x^2 e^x y^4 dx dy.$$

Ennek értéke elemi úton meghatározható: $\frac{64}{5}(-10e^{-2} + 2e^2) \approx 171.8369198783382$. Nézzük meg, hogy x és y esetében eltérő számú alappontot használva milyen értékek adódnak a szorzatszabályt alkalmazva. A kvadratura formula legyen Gauss-Legendre típusú, vagyis a súlyfüggvény azonosan 1. A kapott értékeket a következő táblázat foglalja össze:

$m \setminus n$	2	3	4
2	66.1470807287951	119.0647453118310	119.0647453118313
3	93.2994921917661	167.9390859451787	167.9390859451792
4	95.3962971772393	171.7133349190305	171.7133349190311

Ebben jól látszik a kvadratura formulák első fejezetben már leírt tulajdonsága, miszerint az alappontok számának növelésével a képlet egyre jobban megközelíti az eredeti értéket.

2.3. Példa. Tekintsük most a $p(x) = x^8 y^8$ polinomot, amelyet a 2.1.2 következmény miatt a szorzatszabályt a Gauss kvadratura formulával alkalmazva már nem fogunk tudni pontosan kiintegrálni. Elemi úton meghatározva, az integrál értéke közelítőleg: $8.483886016790123 \cdot 10^8$. Az előző példa táblázata ekkor a következőképpen néz ki:

$m \setminus n$	2	3	4
2	3.849579645639381	5.578398084024348	5.713673592455668
3	5.578398084024349	8.083616407078653	8.279643170131465
4	5.713673592455669	8.279643170131468	8.480423559519064 $\cdot 10^8$

A tenzorszorzat formulák nem optimálisak abban az értelemben, hogy nem a legkevesebb függvénykiértékelést használják adott rend eléréséhez – vagyis az alappontok száma viszonylag sok. Például egy ötödfokú polinom esetében a 2.1.2 következmény alapján tudjuk, hogy legalább 9 pont kell ahhoz, hogy a szorzatszabály pontosan kiértékelje a polinomot. Azonban a direkt formulánál ($Q = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i, y_i)$) már elég

7 pont is, hiszen összesen 21 darab monomiált¹ kell kiértékelni, a szabad változók száma pedig szintén 21 (w_i, x_i, y_i , ahol $i = 1, \dots, 7$).

Nyilván az integrációs tartomány nem feltétlenül egy téglalap. Ekkor úgy járhatunk el, hogy egy téglalapos rácsot borítunk a tartományra, és annak pontjaiban integrálunk. Pontosabb eredményt kapunk azonban, ha az Ω tartományt háromszögekkel közelítjük.

2.4. Integrálás szimplexeken

A háromszögeken való integrálás fontossága abból adódik, hogy jól lehet velük közelíteni bonyolultabb felületeket is. Emellett az ilyen alakzatokon történő integrálás a véges elem módszerek egyik fontos eszköze.

Az alkalmazott eljárások azonban bizonyos tekintetben komplikáltabbak, mint azt téglák esetében láttuk. A következő részben ismertetek néhány, háromszögön értelmezett f függvény integráljának közelítő meghatározására szolgáló módszert.

2.4.1. Integrációs tartomány transzformálása

Az első, természetes módon adódó megközelítés, hogy transzformáljuk át az integrációs tartományt egy téglalappá, amin már az előző részben tárgyalt módszerek alkalmazhatók. Vagyis tekinthetjük az

$$\int_0^1 \left(\int_0^x f(x, y) dy \right) dx = \int_0^1 x \int_0^1 f(x, tx) dt dx. \quad (2.5)$$

integráltranszformációt, ahol az $y = xt$ helyettesítést használtuk. Ez az ún. *Duffy-transzformáció* (Duffy, 1982). Erre pedig már alkalmazhatjuk az előző részben ismertetett szorzatszabályt:

$$Q_{m,n}(f) := \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n w_i w_j f(x_j, t_i x_j) \quad (2.6)$$

Az 2.1.2 következmény miatt ennek a polinomnak a rendje a külön-külön vett interpolációs kvadratúra formulák rendjének a minimuma. Amennyiben az alappontok

¹ *Monomiál* alatt kétváltozós esetben a $cx^a y^b$ alakú polinomokat értjük ($a, b \in \mathbb{N}, c \in \mathbb{R}$), a fenti példában $a + b \leq 5$.

számát egyenlően választjuk meg, vagyis $m = n$, akkor az ún. *Stroud-féle kanonikus szorzatszabályhoz* jutunk:

2.4.1. Állítás. *Ha az (2.6) kvadratúra formulában $m = n$, akkor ahhoz, hogy a kvadratúra formula d -edrendben pontos legyen, legalább $n = \frac{(d+1)^2}{4}$ alappont kell, ha d páratlan.*

Bizonyítás. Nyilván az alappontok száma a külön x , illetve y szerint vett alappontok számának (n_1 és n_2) lesz a szorzata. A 2.1.2 következmény szerint, az előző fejezetben a minimálisan szükséges pontok számáról írtak miatt a két tengelyen vett alappontok számának meg kell egyeznie, és d -edrendű pontosság esetén ez

$d = 2n_1 - 1 = 2n_2 - 1$. Kifejezve n_1 -et és n_2 -t, kapjuk:

$$n = n_1 n_2 = \left(\frac{d+1}{2} \right)^2.$$

□

Az imént ismertetett metódus a háromszögön való integrálásnak azonban csak egy közvetett módszere. Tekintsünk egy másik, még mindig a szorzatszabályt használó metódust.

2.4.2. Tükrözéses módszer

Létezik más megoldás is, amellyel – továbbra is a szorzatszabályt alkalmazva – egy háromszögön értelmezett f függvény integrálját közelíthetjük. Vegyünk egy tetszőleges ilyen alakzatot a síkon. Tudjuk, hogy bármilyen háromszög egy affin transzformációval tetszőleges másik háromszögbe képezhető úgy, hogy az megőrzi a kvadratúra formula rendjét (Stroud, 1971). Ezt kihasználva tegyük a következőt: az előbbi háromszöget képezzük a $(0,0)$, $(0,1)$ és $(1,0)$ pontokkal adott derékszögű háromszögre. Ezt követően tükrözzük az alakzatot az átlóra, így egy 1 oldalhosszúságú négyzetet kapunk. A tükrözésnél feladatunk olyan A mátrix és b vektor keresése, amely esetében a tükrözött háromszög minden pontjára (y) fennáll, hogy

$$y = Ax + b,$$

ahol x az előbb megadott három pontra képezett alakzat tetszőleges koordinátája. A $(0,0)$, $(0,1)$ és $(1,0)$ pontokat az egyenletbe helyettesítve kapjuk, hogy

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Természetesen a tükrözéssel a függvényértékeket is a megfelelő módon hozzárendeltük a tükrözött háromszög pontjaihoz. Ezt követően ezen a négyzeten alkalmazzuk az előző részben ismertetett szorzatszabályt, az így kapott közelítő értéket pedig osszuk le kettővel. Így az eredeti háromszögön való integrálnak szintén egy közelítését kaptuk meg.

2.5. Példa. Vizsgáljuk meg az x^2y^2 polinomra az iménti szabályt, különböző alappontszámok mellett. Ekkor a következőket kapjuk:

$m \setminus n$	2	3	4
2	0.007443033123087	0.003657091168738	0.004340731660444
3	0.003657091168738	0.007740946343118	0.004866914035524
4	0.004340731660444	0.004866914035524	0.006890834995279

Elemi úton meghatározva az integrál értékét 0.005555555555556-t kapunk. Viszonylag pontatlan közelítésnek tűnik az eredmény. Ennek oka, hogy a 1.2.1 és 1.2.2 tételek következtében a nagyobb alappontszám miatt fellépő konvergencia csak csak polinomok esetében biztosított, azonban a tükrözés eredményeképp csak szakaszonkénti polinomokat kapunk.

2.5.1. Dunavant pontok

Az első fejezetben ismertetett okokból a háromszögön való integrálás is a polinomokon való approximációhoz köthető. A közelítő formulát ilyen alakzatok esetében is az (1.2) képletnek megfelelő alakban keressük. Az (x_i, y_i) pontpárokat és a w_i súlyokat ($i = 0, \dots, n$) továbbra is úgy választjuk meg, hogy a formula pontos lesz adott fokszámú polinomokra. Ha a p_1, p_2, \dots, p_M polinomok bázisát alkotják \mathcal{P}_d^2 -nek (vagyis a kétváltozós, legfeljebb d -edfokú polinomok terének), akkor a d -edrendű kubatúra formulát egy egyenletrendszer, az ún. *momentum egyenletek* határozzák

meg. Ezekre tehát fennáll:

$$I(p_i) = Q(p_i) := \sum_{j=0}^m w_j p_i(x_j, y_j), \quad \text{ahol } i = 1, \dots, M, \quad (2.7)$$

és $M = \dim \mathcal{P}_d^2 = \frac{1}{2}(d^2 + 3d + 2)$, vagyis a legfeljebb d -edfokú kétváltozós monomiálok száma. Itt a bal oldalon álló momentumok ismertek, a jobb oldalon álló formulában lévő x_i -k, y_i -k és w_i -k azonban nem.

A fenti M darab egyenletet tekintve két lehetőség van az integrál közelítő meghatározására:

- közvetlenül oldjuk meg ezeket a nemlineáris egyenleteket
- olyan polinomokat keresünk, amelyek eltűnnek a formula alappontjaiban

Ez utóbbi eljárás egy dimenzióban nagyon hatásos eljárás volt, viszont háromszögeken nagyon nehéz ilyen polinomokat találni. Azonban mégis ennek a megközelítésnek az eredménye a következő tétel (Rasputin, 1983 és Stroud, 1960):

2.5.1. Tétel. *Egy d -edrendű kubatúra formulában az alappontok minimális számára (m) háromszögeken való integrálás esetén a következő teljesül:*

$$m = \frac{(d+2)(d+4)}{8}, \quad \text{ha } d \text{ páros}, \quad (2.8)$$

$$m = \frac{(d+1)(d+3)}{8} + \left\lfloor \frac{d+1}{4} \right\rfloor, \quad \text{ha } d \text{ páratlan}. \quad (2.9)$$

A továbbiakban tekintsük a momentum egyenletek megoldásának első megközelítését. Ennek kapcsán a kubatúra formulákra a háromszög *szimetriájának* kihasználásával értek el fontos eredményeket ebben a témakörben. Ez ugyanis lehetővé teszi, hogy a momentumok egyenletek száma – és így a számításigény – jelentősen csökkenjen.

Egy háromszög szimmetriacsoportján hat lineáris transzformációt értünk, amelyek egy meghatározott háromszöget önmagába képeznek. Az egyenlő oldalú háromszög esetében ezek a transzformációk az ún. diédercsoportot (\mathcal{D}_3) alkotják, amely hat elemű: az azonos oldalú háromszög esetén az identitásból, három, a magasságvonalra történő tükrözésből és két forgatásból áll, ezek mátrixai:

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \cos \frac{2\pi}{3} & -\sin \frac{2\pi}{3} \\ -\sin \frac{2\pi}{3} & -\cos \frac{2\pi}{3} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \cos \frac{2\pi}{3} & \sin \frac{2\pi}{3} \\ -\sin \frac{2\pi}{3} & \cos \frac{2\pi}{3} \end{bmatrix}, \\ & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \cos \frac{4\pi}{3} & \sin \frac{4\pi}{3} \\ -\sin \frac{4\pi}{3} & \cos \frac{4\pi}{3} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \cos \frac{4\pi}{3} & -\sin \frac{4\pi}{3} \\ -\sin \frac{4\pi}{3} & -\cos \frac{4\pi}{3} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Vezessük be a következő definíciót:

2.5.2. Definíció (\mathcal{D}_3 -invariáns polinom). *Legyen p tetszőleges, egyenlő oldalú háromszögön értelmezett polinom, g pedig \mathcal{D}_3 egy eleme. Definiáljuk a gp polinomot a következőképpen:*

$$(gp)(x, y) = p(g^{-1}(x, y)).$$

Ekkor azt mondjuk, hogy a p polinom invariáns \mathcal{D}_3 -ra nézve, ha minden $g \in \mathcal{D}_3$ esetén

$$(gp)(x, y) = p(x, y).$$

Nyilván az ilyen polinomok halmaza nem üres, hiszen például 1 , $x^2 + y^2$ vagy $x^3 - 3xy^2$ rendelkeznek ezzel a tulajdonsággal. A momentum egyenletek számának csökkenését a következő két tétel fogja biztosítani.

2.5.3. Tétel. *Legyen p egy tetszőleges polinom az Δ egyenlő oldalú háromszögön. Definiáljuk \hat{p} -t a következőképp:*

$$\hat{p}(x, y) = \frac{1}{|\mathcal{D}_3|} \sum_{g \in \mathcal{D}_3} (gp)(x, y),$$

ahol $|\mathcal{D}_3|$ a diédercsoport elemszámát jelöli, vagyis 6. Ekkor

$$\int_{\Delta} p(x, y) \, dx dy = \int_{\Delta} \hat{p}(x, y) \, dx dy.$$

Ez a tétel következik abból, hogy minden fenti mátrix determinánsa 1.

2.5.4. Tétel (Wandzura és Xiao, (2003)). *Ha p tetszőleges, R -en definiált polinom, akkor az előző tételben definiált \hat{p} polinom \mathcal{D}_3 -invariáns.*

E két tétel következménye, hogy a momentum egyenletek megoldása során elég a \mathcal{D}_3 -invariáns polinomokat tekinteni: p -nek az Δ -n vett integrálja megegyezik a

megfelelő módon ebből képzett \hat{p} ugyanazon a tartományon vett integráljával, amiről azonban feltételezzük, hogy a konstruált kvadratúra formulánkkal pontos lesz.

Ha a háromszög szimmetriáit nem használnánk fel, akkor \mathcal{P}_d^2 bázisaként a következő monomiálokat kellene néznünk:

$$x^i y^j, \quad 0 \leq i + j \leq d,$$

Ebben az esetben a momentumegyenletek száma $\frac{1}{2}(d^2 + 3d + 2)$. Ilyenkor azonban a számításigény nagyon nagy, ezért ennél egyszerűbb megoldásra van szükség.

A 60-as években jelentős előrelépéseket értek el a szimmetria kihasználásával. Kiderült, hogy a $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$ pontok által meghatározott háromszög esetében – ha kikötjük, hogy a formula invariáns a koordináták felcserélésére, – akkor a momentum egyenletek száma jelentősen csökkenthető, egészen $\lfloor \frac{1}{4}(d^2 + 4d + 4) \rfloor$ -ra redukálódik. 2, 3, 4, 5, és 6-odfokú polinomokra léteznek ilyen formulák úgy, hogy a (2.8)-ben tett alsó becslések élesek lesznek.

Később, Lyness és Jespersen (1975) használták ki a háromszög teljes szimmetriáját. Ők a $(-1,0)$, $(1/2, \sqrt{3}/2)$ és $(1/2, -\sqrt{3}/2)$ pontok által meghatározott háromszöget tekintették. Nyilván ez invariáns az origó körüli, $2\pi/3$ -mal történő elforgatásra és az x -tengelyre való tükrözésre. Ilyen módon a momentum egyenletek számát képesek voltak leredukálni $\lfloor \frac{1}{12}(d^2 + 6d + 12) \rfloor$ -re.

Dunavant (1986) erre vonatkozóan végzett számításokat és határozott meg alappontokat egészen 20-adrendű pontosságot biztosítva (2.1 táblázat).

2.6. Példa. Vegyük ismét a 2.5. példában már vizsgált $x^2 y^2$ polinomot. Az elméleti értéke a $(0,0)$, $(0,1)$, $(1,0)$ pontokkal adott háromszögön integrálva $\frac{1}{180} \approx 0.0055555555555556$. Az eredményeket a 2.2 táblázat mutatja. Ahogy vártuk, a Dunavant pontokkal már hat kiértékelés segítségével pontos eredményt kaptunk.

2.1. táblázat. Dunavant alappontjai és súlyai ötödrendig

Rend	Alappontok (x, y)	Súlyok
$n = 2$	0.6667, 0.1667	0.3333
	0.1667, 0.1667	0.3333
	0.1667, 0.6667	0.3333
$n = 3$	0.3333, 0.3333	-0.5625
	0.6000, 0.2000	0.5208
	0.2000, 0.2000	0.5208
	0.2000, 0.6000	0.5208
$n = 4$	0.1081, 0.4459	0.2234
	0.4459, 0.4459	0.2234
	0.4459, 0.1081	0.2234
	0.8168, 0.0916	0.1100
	0.0916, 0.0916	0.1100
	0.0916, 0.8168	0.1100
$n = 5$	0.3333, 0.3333	0.2250
	0.0597, 0.4701	0.1324
	0.4701, 0.4701	0.1324
	0.4701, 0.0597	0.1324
	0.7974, 0.1013	0.1259
	0.1013, 0.1013	0.1259
	0.1013, 0.7974	0.1259

2.2. táblázat. Közelítő integrálás Dunavant pontokkal

Rend	Alappontok	Közelítő érték	Abszolút hiba	Relatív hiba (%)
2	3	0.0042438271604	0.0013117283950	23.6
3	4	0.004444444444444	0.001111111111111	20.0
4	6	0.005555555555555	0.0000000000000	0.0

2.6.1. Newton-Cotes-formula két dimenzióban

Eljárhatunk a következő – végeredményét tekintve elsőre nem túl hatékonynak tűnő – módon is. Vegyük a már vizsgált $(0,0)$, $(0,1)$ és $(1,0)$ pontok által meghatározott háromszöget. Vezessünk be egy új koordinátarendszert, az ezáltal meghatározott tetszőleges pont legyen (L_1, L_2, L_3) . A hagyományos Descartes-féle koordinátarendszerhez a következőképpen kapcsolódjon:

$$x = L_1x_1 + L_2x_2 + L_3x_3 \quad (2.10)$$

$$y = L_1y_1 + L_2y_2 + L_3y_3 \quad (2.11)$$

$$1 = L_1 + L_2 + L_3, \quad (2.12)$$

ahol (x, y) tetszőleges, Descartes-koordinátarendszerbeli pont, esetünkben pedig $(x_1, y_1) = (0,0)$, $(x_2, y_2) = (1,0)$ és $(x_3, y_3) = (0,1)$. Nyilván egy tetszőleges (L_1, L_2, L_3) hármashoz egyértelműen hozzárendelhető egy hagyományos koordinátarendszerbeli pont. Oldjuk meg most a fenti egyenletrendszerünket:

$$L_1 = \frac{a_1 + b_1x + c_1y}{2\Delta}, \quad (2.13)$$

$$L_2 = \frac{a_2 + b_2x + c_2y}{2\Delta}, \quad (2.14)$$

$$L_3 = \frac{a_3 + b_3x + c_3y}{2\Delta}, \quad (2.15)$$

ahol

$$\Delta = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{vmatrix},$$

vagyis Δ a háromszög területe,

$$\begin{aligned} a_1 &= x_2y_3 - x_3y_2, & b_1 &= y_2 - y_3, & c_1 &= x_3 - x_2 \\ a_2 &= x_1y_3 - x_3y_1, & b_2 &= y_3 - y_1, & c_2 &= x_3 - x_1 \\ a_3 &= x_2y_1 - x_1y_2, & b_3 &= y_2 - y_1, & c_3 &= x_2 - x_1. \end{aligned} \quad (2.16)$$

L_i x -től és y -től függ, *baricentrikus koordinátának* nevezzük.

Tekintsük először azt az esetet, amikor a háromszög három csúcspontját használjuk alappontnak. Esetünkben $\Delta = \frac{1}{2}$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$, $x_3 = 0$, $y_1 = 0$, $y_2 = 0$ és

$y_3 = 1$. Ekkor a fenti képletek

$$L_1 = 1 - x - y, \quad L_2 = x, \quad L_3 = y \quad (2.17)$$

alakra egyszerűsödnek le.

Látható, hogy ezek a háromszög egyik csúcspontjában 1-et, a többiben nullát vesznek fel. Az ilyen tulajdonságokkal bíró függvényeket *formafüggvényeknek* nevezük. Vegyük észre, hogy az f függény approximálható ezek segítségével, hiszen:

$$f(x, y) \approx \sum_{i=1}^3 f(x_i, y_i) L_i(x, y),$$

amire teljesül, hogy $f(x_i, y_i) = f(x_i, y_i)$ ($i = 1, 2, 3$).

Integrálva mindkét oldalt:

$$I(f) \approx \sum_{i=1}^3 f(x_i, y_i) \int_{\Delta} L_i(x, y) dx dy =: \sum_{i=1}^3 f(x_i, z_i) w_i$$

kapjuk. Határozzuk most meg az így értelmezett w_i súlyokat. Ez azonnal adódik a következő formulából (Eisenberg, 1973):

$$\int_{\Delta} L_1^a L_2^b L_3^c = \frac{a! b! c!}{(a + b + c + 2)! 2\Delta}. \quad (2.18)$$

Ezt és (2.17)-t felhasználva kapjuk:

$$w := \int_{\Delta} L_1 = \int_{\Delta} L_2 = \int_{\Delta} L_3 = \frac{1}{6} \quad (2.19)$$

Ezeket a formafüggvényeket súlyokként felhasználva az

$$I(f) \approx \sum_{i=1}^3 w f(x_i, y_i) = \frac{1}{6} f(0,0) + \frac{1}{6} f(1,0) + \frac{1}{6} f(0,1) \quad (2.20)$$

módon értelmezett kvadratúra képlet az adott helyen értelmezve első rendű formula.

Nézzük meg a gyakorlati alkalmazásokban fontos 6 alappontszám esetét is. Ekkor a csúcspontok mellett vegyük az oldalfelező pontokat is, összesen 6 pontot. Az előbb a formafüggvények maguk a baricentrikus koordináták voltak. Most azonban az oldalfelező pontokra is megkötéseket kell tennünk, így a formafüggvények (Φ_i) a következők (a formafüggvények meghatározásának általánosításáról lásd Zienkiewitz, 2000, 181. o.):

$$\Phi_i = (2L_1 - 1)L_1 \quad (i = 1, 2, 3), \quad \Phi_i = 4L_1 L_2 \quad (i = 4, 5, 6) \quad (2.21)$$

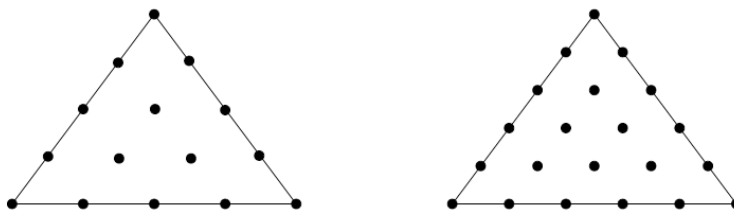
Hasonlóan járunk el magasabb rendű approximációnál is. Az alappontok megválasztása a következőképpen történik (mely egyben a kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjait definiálja):

2.6.1. Definíció (Kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjai). *n -edrendű pontosságot feltételezve feltételezve a Newton-Cotes-formula alappontjainak helyzete a következő:*

- a háromszög csúcspontjai
- $3(n - 1)$ különböző pont a háromszög élein
- $\frac{1}{2}(n - 2)(n - 1)$ különböző pont a háromszög belsejében

A háromszög oldalait n növelésével felezzük, harmadoljuk, stb., a belső pontok pedig az egyes oldalakkal párhuzamosan, egymástól egyenlő távolságban helyezkednek el (lásd 2.6.1 ábra).

2.1. ábra. Kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjai $n = 4$ és $n = 5$ esetén



Az előbb a hat alappont esetét tekintettük, ennyi alapponttal azonban csak a másodrendű pontosság biztosítható. Ezt igazolja a következő állítás:

2.6.2. Állítás. *A kétdimenziós Newton-Cotes-formula esetén n -edrendű pontosság eléréséhez $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ darab alappont szükséges.*

Bizonyítás. A pontok általunk választott elhelyezése miatt az összes, \mathcal{P}_d^2 bázisaként adódó monomiálra, vagyis:

$$x^i y^j, \quad 0 \leq i + j \leq n,$$

alakú polinomokra pontosnak kell lenni a formulánknak. Ilyenből pedig pontosan $\frac{(n+1)(n+2)}{2}$ különböző van. \square

2.6.2. Három dimenzió

A gyakorlatban a kettő mellett a háromdimenziós esetek fordulnak elő leggyakrabban.

Paralelepipedonok esetében használhatjuk a már említett szorzatszabályt. Háromszor alkalmazzuk a $Q_m(F) = \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} F(\xi_i^{(m)}) \approx \int_{-1}^1 F(\xi) d\xi$ alakú, $m + 1$ pontú egydimenziós kvadratúra képletet. Ekkor

$$Q_{m,n,o}(f) := \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^m w_i^{(m)} \frac{d_i - c_i}{2} \sum_{j=0}^n w_j^{(n)} \frac{e_j - f_j}{2} \sum_{k=0}^o w_k^{(o)} f(x_i^{(m)}, y_j^{(n)}, z_k^{(o)}), \quad (2.22)$$

ahol $c_i := c(x_i^{(m)})$, $d_i := d(x_i^{(m)})$, $e_j := e(x_j^{(n)}, y_j^{(n)})$, $f_j := f(x_j^{(n)}, y_j^{(n)})$, $y_j^{(n)} := \frac{(d_i - c_i)\xi_j^{(m)} + (c_i + d_i)}{2}$ és $z_k^{(n)} := \frac{(f_j - e_j)\xi_j^{(m)} + (e_j + f_j)}{2}$, amennyiben a $[-1,1] \times [-1,1] \times [-1,1]$ -en integrálunk. Speciális esetben ezen a tartományon téglatestet tekintve képletünk a már ismert alakra egyszerűsödik:

$$Q_{m,n,o}(f) := \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^o w_i w_j w_o f(x_i^{(m)}, y_j^{(n)}, z_k^{(o)}). \quad (2.23)$$

Tetraéderek esetén a már említett formafüggvények általánosítása útján nyerjük a kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjait. Oldjuk meg tehát a következő egyenletrendszert:

$$x = L_1 x_1 + L_2 x_2 + L_3 x_3 + L_4 x_4 \quad (2.24)$$

$$y = L_1 y_1 + L_2 y_2 + L_3 y_3 + L_4 x_4 \quad (2.25)$$

$$z = L_1 y_1 + L_2 y_2 + L_3 y_3 + L_4 x_4 \quad (2.26)$$

$$1 = L_1 + L_2 + L_3 + L_4. \quad (2.27)$$

Ennek megoldása

$$L_i = \frac{a_i + b_i x + c_i y + d_i z}{6V},$$

ahol

$$6V = \det \begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & z_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & z_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & z_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix},$$

$$a_1 = \det \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \\ x_4 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}, \quad b_1 = -\det \begin{vmatrix} 1 & y_2 & z_2 \\ 1 & y_3 & z_3 \\ 1 & y_4 & z_4 \end{vmatrix}, \quad (2.28)$$

$$c_1 = -\det \begin{vmatrix} x_2 & 1 & z_2 \\ x_3 & 1 & z_3 \\ x_4 & 1 & z_4 \end{vmatrix}, \quad d_1 = -\det \begin{vmatrix} x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \\ x_4 & y_4 & 1 \end{vmatrix}, \quad (2.29)$$

$i = 2, 3, 4$ -re pedig az indexek megfelelő cseréjével adódnak az együtthatók. Miután tudjuk az egyes L_i -ket, a Φ_i formafüggvények már meghatározhatók. Majd – a két-dimenziós esethez hasonlóan – súlyokként felhasználva ezeket kapjuk:

$$I(f) \approx \sum_{i=1}^3 f(x_i, y_i, z_i) \int_{\Delta} \Phi_i(x, y, z) dx dy dz =: \sum_{i=1}^3 f(x_i, y_i, z_i) w_i$$

A rendet vizsgálva a 2.6.2-ban megfogalmazott állítás három dimenziós megfelelője a következő:

2.6.3. Állítás. *Három dimenzióban a Newton-Cotes-formulával n -edrendű pontosság eléréséhez $\frac{(n+1)(n^2+5n+6)}{6}$ darab alappont szükséges.*

A 2.6.2 táblázatban néhány eltérő alappontszám esetére ismertetek súlyokat és alappontokat tetraédereken történő integráláshoz (az alappontok a már ismertetett baricentrikus koordinátákkal vannak megadva). M annak a számát, hogy az adott súlyhoz tartozó koordináta pontjait hányszor kell permutálni a kvadratúra képletben.

2.7. Összehasonlítás

A eddig tárgyalt szabályokat érdemes egymással összehasonlítani. A következő táblázat az egyes tárgyalt szabályok adott rend eléréséhez minimálisan szükséges pontjainak a számát tartalmazza (2 dimenzióra).

Alappontok száma (rend)	w_i	L_1, L_2	L_3, L_4	M	
$n = 1$ (1)	1.00000000	0.25000000	0.25000000	1	
		0.25000000	0.25000000		
$n = 4$ (2)	0.25000000	0.58541019	0.13819660	4	
		0.13819660	0.13819660		
$n = 5$ (3)	-0.80000000	0.25000000	0.25000000	1	
		0.25000000	0.25000000		
		0.45000000	0.50000000	0.16666667	4
			0.16666667	0.16666667	
$n = 11$ (4)	-0.01315555	0.25000000	0.25000000	1	
		0.25000000	0.25000000		
		0.00762222	0.78571428	0.07142857	4
			0.07142857	0.07142857	
		0.02488889	0.39940357	0.39940357	6
			0.39940357	0.39940357	

2.3. táblázat. Alappontok és súlyok tetraéderen történő integrálásnál

Szabály \ rend	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Elméleti	1	3	4	6	7	10	12	15	17	21
Dunavant	1	3	4	6	7	12	13	16	19	24
Szorzatszabály	1	4	4	9	9	16	16	25	25	36
Newton-Cotes	3	6	10	15	21	28	36	45	55	121

2.4. táblázat. Alappontok száma különböző pontosság mellett

A Dunavant pontok tűnnek a "leggazdaságosabbnak" abban az értelemben, hogy tetszőleges rend esetén a legközelebb vannak az elméleti értékhez. A kétdimenziós Newton-Cotes-formula alkalmazása nem tűnik célszerűnek, hiszen adott rend eléréséhez jóval több pontra, és azon történő kiértékelésre van szükség, mint az előbbi esetben.

Ennek ellenére ha az integrál az így vizsgált pontok jelentős részében eltűnik

(köszönhetően a pontok elhelyezkedésének), akkor érdemes lehet ilyen pontokat alkalmazni. Erre mutat példát a következő fejezet.

3. fejezet

Peremértékfeladatok gyenge megoldása végeselem módszerrel

Az előbb leírt módszerek egyik legfontosabb alkalmazása a peremértékfeladatok gyenge (általánosított) megoldásának végeselem módszerrel történő meghatározása során jelentkezik.

3.1. Az alapprobléma és annak elméleti háttere egy dimenzióban

Tekintsük a következő másodrendű közönséges differenciálegyenletet az $I = [0,1]$ intervallumon:

$$-(pu')' + ku = f, \quad (3.1)$$

ahol $p \geq p_0 > 0$, $k \geq k_0 > 0$, $p, k \in L_\infty$. Vegyük hozzá ehhez az ún. *Dirichlet-peremfeltételt*:

$$u(0) = a \text{ és } u(1) = b. \quad (3.2)$$

Szűkítsük tovább a megoldandó problémát az ún. *homogén Dirichlet-feladatra* az $a = b = 0$ megkötéssel. Alapfeladatunk tehát a következő:

$$\begin{aligned} -(pu')' + ku &= f \\ u(0) = u(1) &= 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Ennek a feladatnak a klasszikus megoldásán egy $u \in C^2(0,1)$ függvényt értünk. Gyakran azonban gyengébb simasági feltételek teljesülnek a p és k függvényekre. Vegyük példaként a következő feladatot a $I = [0,1]$ intervallumon:

$$u''(x) = \operatorname{sgn}(x) \quad (3.4)$$

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (3.5)$$

Itt a jobb oldalon csak szakaszonként folytonos függvény áll, így klasszikus megoldás nem létezik. Azonban az $u(x) = \frac{x|x|}{2} - \frac{1}{2}x$ olyan abszolút folytonos függvény, amelynek a második deriváltja majdnem mindenütt létezik, teljesíti a peremfeltételeket és egyenlő a sgn függvénnyel. Célszerű ezért a klasszikus megoldásfogalom helyett egy másik – *gyengébb* – fogalmat bevezetni.

Vegyük egy tetszőleges $v \in H_0^1(0,1)$ függvényt, ahol $H_0^1(0,1) := \{v \in L^2[0,1] : v' \in L^2[0,1], v(0) = v(1) = 0\}$. Szorozzuk be ezzel a v -vel (3.3) jobb oldalát, majd integráljunk $I = [0,1]$ -en. Ekkor a

$$\int_0^1 (-(pu')'v) + \int_0^1 kuv = \int_0^1 fv \quad \forall v \in H_0^1(0,1), \quad (3.6)$$

bal oldalának első tagját parciálisan integrálva kapjuk:

$$\underbrace{\int_0^1 (pu'v' + kuv)}_{a(u,v)} = \underbrace{\int_0^1 fv}_{\varphi(v)} \quad \forall v \in H_0^1(0,1). \quad (3.7)$$

3.1.1. Definíció (Gyenge megoldás). *Az $u \in H_0^1(0,1)$ függvényt a (3.3) peremértékfeladat gyenge megoldásának nevezzük, ha*

$$a(u, v) = \varphi(v)$$

teljesül minden $v \in H_0^1(0,1)$ -re.

A fent definiált $H_0^1(0,1)$ zárt altere $H^1(0,1) := \{v \in L^2[0,1] : v' \in L^2[0,1]\}$ -nek, amely az $\langle u, v \rangle_{H^1(0,1)} = \int_0^1 uv + u'v'$ skalárszorzattal ellátva Hilbert-tér. Vezessünk be néhány jelölést:

$$- \|u\|_0^2 := \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_0^1 u^2(x) dx,$$

$$- |u|_1^2 := \|u'\|_0^2 = \int_0^1 (u'(x))^2 dx,$$

$$- \|u\|_1^2 := \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 = \|u\|_0^2 + |u|_1^2,$$

ahol $\|\cdot\|_0$ és $\|\cdot\|_1$ valóban norma, $|\cdot|_1$ pedig félnorma.

Lássuk most be, hogy az így bevezetett $|\cdot|_1$ félnorma és a $\|\cdot\|_1$ norma ekvivalensek. Nyilván teljesül, hogy

$$|v|_1^2 = \int_0^1 (v'(x))^2 dx \leq \int_0^1 (v'(x))^2 dx + \|u\|_0^2 = \|v\|_1^2$$

Emellett az így bevezetett normákra és félnormára igaz a következő tétel:

3.1.2. Tétel (Poincare-Friedrichs egyenlőtlenség). *Létezik olyan $c > 0$, hogy minden $v \in H_0^1(0,1)$ -ra*

$$|v|_1^2 = \int_0^1 |v'|^2 \geq c \int_0^1 |v|^2 = c\|v\|_0^2$$

teljesül.

3.1.3. Következmény. *$H_0^1(0,1)$ -en a fent definiált $|\cdot|_1$ félnorma és a $\|\cdot\|_1$ norma ekvivalens, vagyis létezik olyan $c > 0$ és $C > 0$ úgy, hogy $\forall u \in H_0^1(0,1)$ esetén*

$$c|u|_1 \leq \|u\|_1 \leq C|u|_1.$$

Vizsgáljuk most meg, mit mondhatunk a 3.1.1-ban definiált gyenge megoldás egyértelműségéről. Általánosítva a problémát, legyen $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ vagy \mathbb{C} szimmetrikus, bilineáris függvény, melyre teljesülnek a

- **folytonos**, azaz $|a(u, v)| \leq M\|u\|_V\|v\|_V \quad \forall u, v \in V$,
- **koercitív**, azaz $|a(v, v)| \geq m\|v\|_V^2 \quad \forall v \in V$,

tulajdonságok valamilyen $m, M > 0$ számokra. Ilyen feltételek mellett az $a(\cdot, \cdot)$ skaláris szorzatot definiál a V térben, $\langle u, v \rangle_a := a(u, v)$, és az ebből származtatott norma ($\|u\|_a = \sqrt{\langle u, u \rangle_a}$) ekvivalens az eredeti skaláris szorzatból származtatott normával, hiszen a folytonosság és a koercitivitás miatt

$$m\|v\|_V^2 \leq |a(v, v)| \leq M\|v\|_V^2 \tag{3.8}$$

Legyen továbbá $\varphi : V \rightarrow \mathbb{R}$ adott folytonos, lineáris funkcionál.

3.1.4. Definíció (Absztrakt variációs feladat). *Olyan $u \in V$ függvény keresése, melyre teljesül*

$$a(u, v) = \varphi(v) \quad \forall v \in V\text{-re.} \quad (3.9)$$

3.1.5. Tétel. *Az így definiált absztrakt variációs feladatnak minden φ folytonos lineáris funkcionál esetén létezik egyértelmű megoldása.*

Bizonyítás. φ folytonossága miatt alkalmazható Riesz reprezentációs tétele. Vagyis egyértelműen létezik $u \in V$, amelyre $\varphi(v) = \langle u, v \rangle_a = a(u, v)$. Az egyértelműség belátásához tegyük fel, hogy létezik két megoldás: u_1 és u_2 . Ezeket behelyettesítve a -ba, majd kihasználva annak linearitását kapjuk, hogy $a(u_1 - u_2, v) = 0 \quad \forall v \in V$, tehát $u_1 - u_2 \in V$ -re is, vagyis $a(u_1 - u_2, u_1 - u_2) = 0$. Felhasználva a koercitivitását, $0 = a(u_1 - u_2, u_1 - u_2) \geq m \|u_1 - u_2\|_V^2$ adódik, ami nyilván csak $\|u_1 - u_2\| = 0$, azaz $u_1 = u_2$ esetén lehetséges. \square

Ellenőrizzük le a tétel feltételeit az 3.1.1-ben definiált gyenge megoldásra. A folytonosságot igazolandó $|\varphi(v)| = \left| \int_0^1 f v \right| \leq \sqrt{\int_0^1 |f|^2} \sqrt{\int_0^1 |v|^2} \leq \|f\|_0 \|v\|_0 \leq \|f\|_0 \|v\|_1$, ahol a Cauchy-Schwartz-egyenlőtlenséget, illetve az egyes normák definícióit használtuk fel. A linearitás a határozott integrál tulajdonságait felhasználva triviálisan adódik. Tehát φ tényleg folytonos lineáris funkcionál. Hasonlóan adódik a -ra a szimmetria és a linearitás. A folytonosság igazolásához használjuk fel, hogy $p, k \in L_\infty$, emiatt létezik $P, K > 0$ úgy, hogy $P \geq |p(x)|$ és $K \geq |k(x)|$ majdnem minden x -re. Ekkor

$$\begin{aligned} |a(u, v)| &= \left| \int_0^1 p u' v' + \int_0^1 k u v \right| \leq \int_0^1 |p u' v'| + \int_0^1 |k u v| \leq \\ &\leq \max\{P, K\} \left[\int_0^1 |u' v'| + \int_0^1 |u v| \right] \leq \\ &\leq M \left[\sqrt{\int_0^1 |u'|^2} \sqrt{\int_0^1 |v'|^2} + \sqrt{\int_0^1 |u|^2} \sqrt{\int_0^1 |v|^2} \right] = M[ab + AB] = \\ &= M(a, A)(b, B)^T \leq M(\|(a, A)^T\| \|(b, B)^T\|) \leq \\ &\leq M(\sqrt{a^2 + A^2} \sqrt{b^2 + B^2}) = M \|u\|_{H_0^1(0,1)} \|v\|_{H_0^1(0,1)}, \end{aligned}$$

adódik, vagyis a folytonosság is teljesül a -ra. A koercitivás az

$$|a(u, u)| = \int_0^1 p |u'|^2 + \int_0^1 k |u|^2 \geq \int_0^1 p_0 |u'|^2 \geq \frac{p_0}{1 + \frac{1}{c}} \|u\|_{H_0^1(0,1)}^2,$$

egyenlőtlenségből adódik, ahol felhasználtuk, hogy $\|u\|_{H_0^1(0,1)}^2 = \int_0^1 (|u|^2 + |u'|^2) \leq \leq (1 + \frac{1}{c}) \int_0^1 |u'|^2$, ahol az egyenlőtlenség a Poincaré-Friedrichs egyenlőtlenségből következik.

3.1.6. Következmény. *Az (3.7) variációs feladatnak mindig létezik egyértelmű megoldása.*

3.2. Megvalósítás

Felmerül a kérdés, hogyan keressük meg ezt a megoldást. Ehhez diszkretizáljuk a problémát. Tekintsük a $V_h \subset H_0^1$ véges dimenziós alteret. Feladatunk olyan u_h keresése, amelyre

$$a(u_h, v_h) = \varphi(v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (3.10)$$

a -t és φ -t pedig szűkítsük le úgy V_h -ra, hogy továbbra is eleget tegyenek a 3.1.5 tétel feltételeinek. Ekkor igaz a következő tétel:

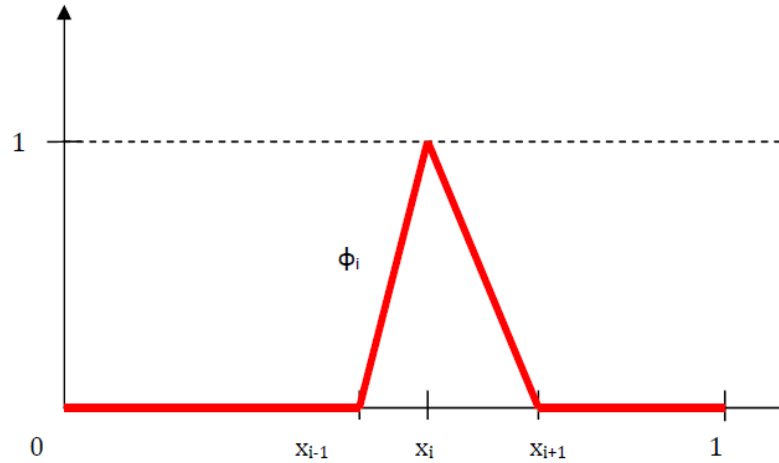
3.2.1. Tétel. *Az így definiált diszkrét problémának mindig létezik egyértelmű megoldása.*

Kérdés: hogyan válasszuk meg a V_h teret úgy, hogy az u megoldást könnyen meg tudjuk határozni. Ehhez először partícionáljuk az integrációs tartományt, vagyis a $[0,1]$ intervallumot N részre: $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = 1$, és vezessük be a $h_i := x_i - x_{i-1}$, ($i = 1, \dots, N$) jelölést. Definiáljuk ezen a Φ_i függvényeket ($i = 1, \dots, N-1$) a következőképpen:

$$\Phi_i(x) := \begin{cases} \frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1}-x}{x_{i+1}-x_i} & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{egyébként,} \end{cases}$$

vagyis Φ_i az x_i pontban 1-et vesz fel, a két szomszédos tartományon egy elsőfokú polinom, egyébként pedig nulla (3.1 ábra). Az ilyen függvényeket *kalapfüggvényeknek* nevezzük.

Legyen V_h az ilyen függvények által kifeszített tér: $V_h := \text{span}\{\Phi_1, \dots, \Phi_{N-1}\}$. Ekkor keressük a megoldást $u_h(x) := \sum_{i=1}^{N-1} c_i \Phi_i(x)$ alakban, vagyis keressük meg



3.1. ábra. Kalapfüggvény

azokat a c_i együtthatókat, amelyekre teljesül (3.17). Az így definiált u_h -t és egy tetszőleges Φ_j -t ($j = 1, \dots, N-1$) (3.17)-ba helyettesítve, valamint kihasználva a bilinearitását egy lineáris egyenletrendszert kapunk:

$$\varphi(\Phi_j) = a(u_h, \Phi_j) = a\left(\sum_{i=1}^{N-1} c_i \Phi_i, \Phi_j\right) = \sum_{i=1}^{N-1} c_i a(\Phi_i, \Phi_j), \quad (j = 1, \dots, N-1).$$

Mátrixos alakban felírva:

$$\begin{bmatrix} a(\Phi_1, \Phi_1) & a(\Phi_1, \Phi_2) & \dots & a(\Phi_1, \Phi_{N-1}) \\ a(\Phi_2, \Phi_1) & a(\Phi_2, \Phi_2) & \dots & a(\Phi_2, \Phi_{N-1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a(\Phi_{N-1}, \Phi_1) & a(\Phi_{N-1}, \Phi_2) & \dots & a(\Phi_{N-1}, \Phi_{N-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varphi(\Phi_1) \\ \varphi(\Phi_2) \\ \vdots \\ \varphi(\Phi_{N-1}) \end{bmatrix}.$$

A bal oldali együtthatómátrix jelentősen leegyszerűsödik, ha észrevesszük, hogy $|i-j| > 1$ esetén $a(\Phi_i, \Phi_j) = 0$, hiszen az a definíciójában szereplő integrandus mindkét tagja nulla lesz. Így egy tridiagonális mátrixot kapunk, melynek nemnulla elemei a Φ_i függvények speciális megválasztása miatt elemi úton könnyen meghatározhatók:

$$(a(\Phi_i, \Phi_j))_{i,j} := \begin{cases} -\frac{p}{h_i} + \frac{kh_i}{6}, & j = i-1 \\ p\left(\frac{1}{h_i} + \frac{1}{h_{i+1}}\right) + k\left(\frac{h_i}{3} + \frac{h_{i+1}}{3}\right), & j = i \\ -\frac{p}{h_{i+1}} + \frac{kh_{i+1}}{6}, & j = i+1 \\ 0 \text{ egyébként} \end{cases} \quad (3.11)$$

A jobb oldal egyes komponenseinek meghatározása elemi úton általában nem lehetséges. Ekkor alkalmazhatjuk az első fejezetben ismertetett numerikus módszereket. Vagyis célunk $\varphi(\Phi_i) = \int_0^1 f\Phi_i$ meghatározása. Vegyük észre, hogy Φ_i definíciója miatt $[0,1]$ helyett elég egy kisebb tartományon, $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ -n integrálni.

Az imént ismertetett módszer konvergenciáját jellemzi a következő tétel:

3.2.2. Tétel. $|u - u_h|_1 \leq Ch\|u''\|_0$, ahol u a variációs feladat pontos megoldása, u_h pedig a diszkrét variációs feladat megoldása.

3.3. Példa. Vegyük a következő feladatot:

$$u''(x) + u(x) = e^{-x^2} \quad (3.12)$$

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (3.13)$$

Az egyszerűség kedvéért osszuk csak négy egyenlő részre az $I = [0,1]$ intervallumot. Ekkor (3.14)-be helyettesítve kapjuk:

$$(a(\Phi_i, \Phi_j))_{i,j} := \begin{cases} \frac{97}{24}, & j = i - 1 \\ -\frac{47}{6}, & j = i \\ \frac{97}{24}, & j = i + 1 \\ 0 & \text{egyébként} \end{cases} \quad (3.14)$$

Az $\int_0^1 e^{-x^2} \Phi_i(x) dx$ tagokat az első fejezetben leírt módszerrel számítottam ki (ezt kifejtteni). Ekkor a következő adódik:

$$\begin{bmatrix} \frac{47}{6} & \frac{97}{24} & 0 \\ \frac{97}{24} & \frac{47}{6} & \frac{97}{24} \\ 0 & \frac{97}{24} & \frac{47}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.2328 \\ 0.1413 \\ 0.0625 \end{bmatrix}.$$

Az egyenletrendszert megoldva kapjuk: $c_1 = -0.0169$, $c_2 = 0.0904$ és $c_3 = -0.0387$, vagyis $u_h = -0.0169\Phi_1 + 0.0904\Phi_2 - 0.0387\Phi_3$ alakban adódik.

3.4. Az alapprobléma és annak elméleti háttere két dimenzióban

Tekintsük most az (3.3)-ben megfogalmazott alapfeladatot két dimenzióban. A továbbiakban a jelölések egyszerűsítése végett tegyük fel, hogy $\Omega = [0,1]^2$. Legyen

$p \geq p_0 > 0$, $p \in L_\infty(\Omega)$, $k \geq 0$, $k \in L_\infty(\Omega)$, $\Gamma = \partial(\Omega)$. Ekkor

$$-\operatorname{div}(p\nabla u) + ku = f \quad \Omega - n, \quad (3.15)$$

ahol $\nabla u = \operatorname{grad} u = (\partial_1 u, \partial_2 u)$. Az ehhez tartozó Dirichlet peremfeltétel: $u|_\Gamma = 0$. Az így definiált egyenlet a peremfeltétellel együtt egy *elliptikus parciális differenciálegyenlet*. Az előző részben leírtakhoz hasonlóan vegyünk egy elég sima $v \in H_0^1(\Omega)$ függvényt, amire teljesül $v|_\Gamma = 0$. Szorozzuk be ezzel (3.15) mindkét oldalát, majd integráljunk Ω -n. Felhasználva, hogy v a peremen nulla, Gauss tételéből következik az $\int_\Omega (-\operatorname{div}(p\nabla u))v \, d\Omega = \int_\Omega p\nabla u \nabla v \, d\Omega$ egyenlőség. Ezt az előbbi integrálba helyettesítve kapjuk:

$$\int_\Omega p\nabla u \nabla v \, d\Omega + \int_\Omega kuv \, d\Omega = \int_\Omega fv \, d\Omega.$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$a(u, v) := \int_\Omega p\nabla u \nabla v \, d\Omega + \int_\Omega kuv \, d\Omega, \quad \varphi := \int_\Omega fv \, d\Omega.$$

Az egydimenziós esethez hasonlóan belátható, hogy az így értelmezett a folytonos, lineáris és koercitív, φ pedig folytonos. Ezen tulajdonságok fennállása esetén belátható a megoldás egyértelműsége is.

Célunk tehát ismét olyan u függvény keresése, amelyre teljesül

$$a(u, v) = \varphi(v) \quad \forall v \in V\text{-re.} \quad (3.16)$$

3.5. Megvalósítás

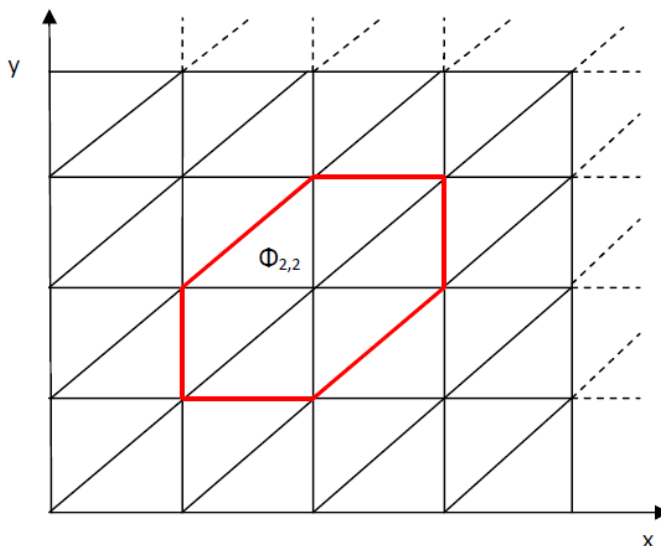
Az egydimenziós esethez hasonlóan a megoldást ismét diszkretizálás útján nyerjük. Tekintsük a $V_h \subset H_0^1$ véges dimenziós alteret. Feladatunk ismét olyan u_h keresése, amelyre

$$a(u_h, v_h) = \varphi(v_h) \quad \forall v_h \in V_h. \quad (3.17)$$

a -t és φ -t szűkítsük le úgy V_h -ra, hogy továbbra is eleget tegyenek a 3.1.5 tétel feltételeinek. Ekkor igaz a következő tétel:

3.5.1. Tétel. *Az így definiált diszkrét problémának mindig létezik egyértelmű megoldása.*

Kérdés: hogyan válasszuk meg a V_h teret úgy, hogy az u megoldást könnyen meg tudjuk határozni. Ehhez először osszuk fel az integrációs tartományt, $[0,1] \times [0,1]$ -et háromszögekre az 3.2. ábrán látható módon.



3.2. ábra. Bázisfüggvény két dimenzióban

$\Phi_{i,j}$ -t értelmezzük a következőképpen: 1-et vegyen fel az (x_i, y_j) pontban, az ebben a pontban érintkező háromszögeken a függvény lineáris, egyébként pedig nulla. Legyen V_h az ilyen függvények által kifeszített tér: $V_h := \text{span}\{\Phi_{1,1}, \dots, \Phi_{N-1,N-1}\}$. Ekkor keressük a megoldást $u_h(x) := \sum_{i,j=1}^{N-1} c_{i,j} \Phi_{i,j}(x)$ alakban, vagyis keressük meg azokat a $c_{i,j}$ együtthatókat, amelyekre teljesül (3.17). Az így definiált u_h -t és egy tetszőleges $\Phi_{i,j}$ -t ($i, j = 1, \dots, N-1$) (3.17)-ba helyettesítve, valamint kihasználva a bilinearitását egy lineáris egyenletrendszert kapunk:

$$\varphi(\Phi_{k,l}) = a(u_h, \Phi_{k,l}) = a\left(\sum_{i,j=1}^{N-1} c_{i,j} \Phi_{i,j}, \Phi_{k,l}\right) = \sum_{i,j=1}^{N-1} c_{i,j} a(\Phi_{i,j}, \Phi_{k,l}), \quad (3.18)$$

ahol $(k, l = 1, \dots, N-1)$. A cél ismét a $c_{i,j}$ konstansok meghatározása. Definíció-szerűen

$$a(\Phi_{i,j}, \Phi_{k,l}) = \int_{\Omega} p \nabla \Phi_{i,j} \nabla \Phi_{k,l} d\Omega + \int_{\Omega} k \Phi_{i,j} \Phi_{k,l} d\Omega,$$

ami $|i - k| > 1$ vagy $|j - l| > 1$ esetén nullával egyenlő, valamint akkor is eltűnik, ha $i - k = 1, j - l = 1$ vagy $i - k = -1, j - l = -1$. Azok az $a(\Phi_{i,j}, \Phi_{k,l})$ számok, amelyek nem nullák, a $\Phi_{i,j}$ -k konstrukciója miatt könnyen meghatározhatók. Azonban (3.18) bal oldalának, vagyis $\varphi(\Phi_{k,l}) = \int_{\Omega} f \Phi_{k,l} d\Omega$ -nek az elemi úton történő kiszámítása általában nem lehetséges. Ebben az esetben a második fejezetben ismertetett numerikus módszerek alkalmazhatók. Mivel tetszőleges háromszög egy affín transzformációval átvihető egy másikba, ezért elég a korábbi $(0,0)$, $(1,0)$ és $(0,1)$ pontok által kifeszített háromszögon vizsgálnunk a problémát. Mint azt az előző fejezetben láttuk, ha $\varphi(\Phi_{k,l})$ meghatározásához adott pontosság elérése mellett a kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjait szeretnénk használni, akkor ehhez a Dunavant pontokhoz képest jóval több kiértékelést kellene végeznünk. Azonban a konstrukciójuk következtében a kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjainak jelentős részében a formafüggvények eltűnnek. Ennek szemléltetésére tekintsük a következő példát. Az egyszerűség kedvéért tekintsünk másodfokú formafüggvényeket, amihez vegyük a negyedrendű pontosságot biztosító kétdimenziós Newton-Cotes-formula alappontjait (2.6.1 ábra). A 2.6.2 állításból tudjuk, hogy ehhez 15 pontra van szükségünk. A hat másodrendű formafüggvényt (2.21)-ben baricentrikus koordinátákkal kifejezve már megadtam, most – Descartes-féle koordinátarendszerben – újra felsorolom őket (rögzített k, l esetén, a fent meghatározott háromszögek egyikén vizsgálom a Φ formafüggvényt, a jelölések egyszerűsítése miatt az alsó két indexet elhagyom, a felső index pedig azt jelzi, a Newton-Cotes-formula hányadik sorszámú alappontjához tartozó formafüggvényt tekintem)

$$\Phi^1(x, y) = 2(x + y - 1) \left(x + y - \frac{1}{2} \right),$$

$$\Phi^2(x, y) = 2x \left(x - \frac{1}{2} \right),$$

$$\Phi^3(x, y) = 2y \left(y - \frac{1}{2} \right),$$

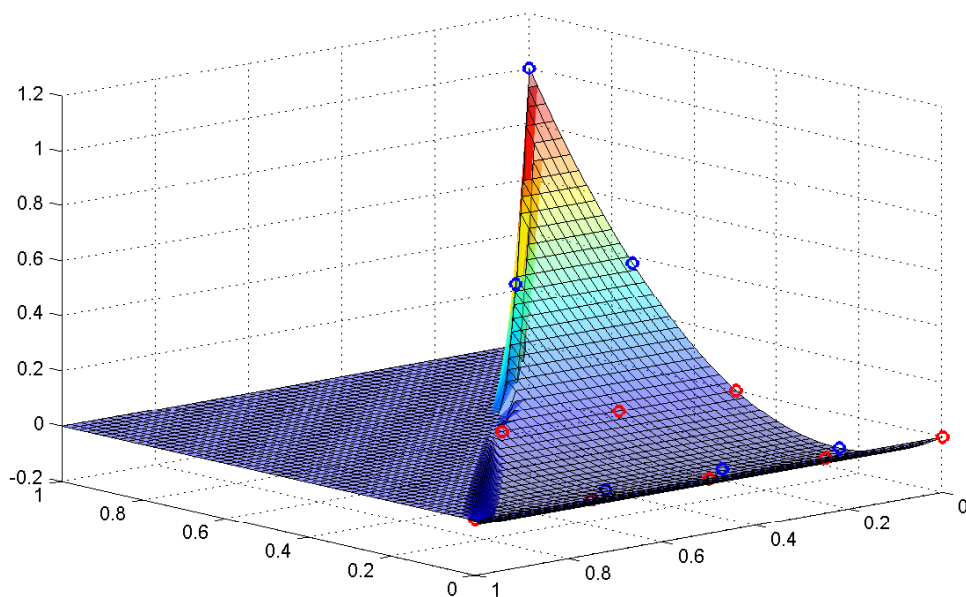
$$\Phi^4(x, y) = 4xy,$$

$$\Phi^5(x, y) = -4y(x + y - 1),$$

$$\Phi^6(x, y) = -4x(x + y - 1).$$

Vegyünk például az $(1,0)$ ponthoz tartozó formafüggvényt (Φ^2). Látható, hogy ez

az y tengelyen lévő pontokban 0, emellett ugyanez igaz az $y = \frac{1}{2}$ egyenesen lévő pontokra is. Így összesen $15 - 5 - 3 = 7$ ponton kell az integrált meghatároznunk, ami csak 1-gyel tér el a Dunavant pontok számától és az elméleti értéktől. A következő ábra a Φ formafüggvényt mutatja a $[0,1] \times [0,1]$ tartományon, piros illetve kék körökkel jelölve a formula alappontjai közül azokat, ahol a függvény eltűnik, illetve ahol a függvényérték nem nulla és ki kell értékelnünk a függvényt. Ugyan még így



3.3. ábra. Φ formafüggvény a $[0,1] \times [0,1]$ tartományon

is több kiértékelésre van szükség, mint a Dunavant pontok esetében, azonban míg a Dunavant pontok helyzetének meghatározása magasabb rend esetén rendkívül számításigényes, addig a Newton-Cotes-formula alappontjai az egyszerű konstrukciójuk miatt könnyen adódnak.

Összegzés

Dolgozatomban a numerikus integrálásnak az elliptikus egyenletek véges elem módszerrel történő megoldásában játszott szerepét tekintetem át. Ezt megalapozva az első fejezet a függvények integrálásánál leggyakrabban alkalmazott numerikus eljárásokat mutatta be. A ismertetett módszerek egyrészt az egydimenziós peremértékfeladatok megoldásánál alkalmazhatók, másrészt a gyakorlati alkalmazásokban fontos kétdimenziós eset általánosításaként szolgálnak, elsősorban a téglákon történő numerikus integrálás kapcsán.

A második fejezetben a kétdimenziós esetet vizsgáltam. A téglákon való integrálásnál a szorzatszabály, mint az előző fejezet Gauss formulájának általánosítása jelent meg. A háromszögön történő integrálás kapcsán három eltérő megoldást alkalmaztam. A tükrözéses módszer a szorzatszabályra vezette vissza a problémát, azonban a tükrözés kapcsán keletkező szakaszonkénti polinomok miatt rendkívül pontatlannak bizonyult. A Dunavant pontok a háromszög szimmetriatulajdonságait felhasználva csökkentik a momentumegyenletek, így a kvadratúra képletbeli kiértékelések számát. Ezek száma rendkívül közel jár az adott rendhez szükséges pontosság eléréséhez, azonban magasabb rend esetén meghatározásuk nehézkes. A kétdimenziós Newton-Cotes formula alappontjainak száma jóval nagyobb, mint az elméleti értéknél vagy a Dunavant pontoknál tapasztaltak, azonban egyszerű konstrukciójuk miatt ezek tetszőleges pontosságra könnyen meghatározhatók.

A harmadik részben az eddig ismertetett eljárások peremértékfeladatok véges elem módszerrel történő megoldásában való alkalmazhatóságát tekintetem át. Kétdimenziós esetben, az egyenlet diszkretizálása után a jobb oldal, vagyis $\varphi(\Phi_{k,l}) = \int_{\Omega} f \Phi_{k,l} d\Omega$ meghatározásában játszanak szerepet a korábbi módszerek. Ez ugyanis elemi úton általában nem határozható meg. A Newton-Cotes formula alkalmazása

ekkor tekinthető gazdaságosnak. Egyszerű konstrukciójuk miatt nemcsak könnyen meghatározható a helyzetük, hanem megfelelő formafüggvény választása mellett a pontok jó részében a formafüggvény értéke – és így az integrál is – nulla. Így a szükséges kiértékelések száma jelentősen csökkenthető.

Irodalomjegyzék

F. Salieri, A. Quarteroni, és R. Sacco. *Numerical Mathematics*. Springer Verlag, 2000.

A. Dahlquist, G. és Björck. *Numerical methods in scientific computing I*. SIAM, 2008.

Michael G. Duffy. Quadrature over a pyramid or cube of integrands with a singularity at a vertex. 19(6):1260–1262, December 1982. ISSN 0036-1429 (print), 1095-7170 (electronic).

J. N. Lyness és Ronald Cools. A survey of numerical cubature over triangles. In *Proceedings of Symposia in Applied Mathematics*, pages 127–150. American Mathematical Society, 1994.

Stoyan Gisbert és Takó Galina. *Numerikus módszerek I*. Typotex, 2002.

Christoph W. Krommer, Arnold R. és Ueberhuber. *Numerical integration on advanced computer systems*. Springer-Verlag, 1994.

Philip J. Davis és Philip Rabinowitz. *Methods of Numerical Integration*. Academic Press, Inc., 1975.

R. Stoer, J. és Bulirsch. *Introduction to Numerical Analysis*. Springer-Verlag, 2nd edition, 1993.

Arthur H Stroud. *Approximate calculation of multiple integrals*. Prentice-Hall series in automatic computation. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1971.

Horváth Tamás. *Végelemek módszerek alapjai*. Egyetemi jegyzet, 2009.

NYILATKOZAT

Név: Horváth Norbert

ELTE Természettudományi Kar, szak: Matematika Bsc

ETR azonosító: HONPABT.ELTE

Szakedolgozat címe: Többváltozós függvények integrálása téglákon és szimplexe-
ken

A **szakedolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a
dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatko-
zások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt
részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2010.05.26.

hallgató aláírása