FIZNUM II. 02.09.

interneten majdnem minden fent van → könyv is
évvégéig beadandók + szóbeli vizsga

Adatmodellezés, függvényillesztés

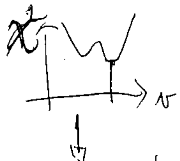
számítógép → diszkrét, véges felbontás
a megoldási idő hogyan skálázik? $T \sim N$, $T \sim \sqrt{N}$, $T \sim N^2$
memória, idő, felbontás $\vee$ $\xrightarrow{\text{hibája}}$ optimalizálni kell
a hibákat valahogy minimalizálni kell

VALÓSÁG → MODELL → MATEMATIKA → ALGORITMUS → KÓD → GÉPI KÓD
→ ezzel foglalkozunk

Mérési/szimulációs adatokhoz keresünk egy függvényt (→ modell)
- összhangban van az elmélettel
- jól visszaadja a mérési eredményeket
- paraméterezhető

A paramétereknek gyakran fizikai jelentése van
- különböző paraméterrel más-más az illesztedés jósága

Keressük a legjobb paramétereket ...



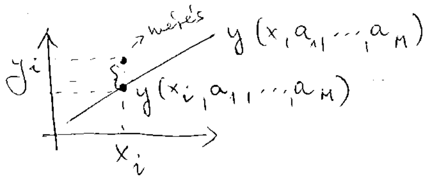
χ^2 illesztés eltérése → minimuma

költségfüggvény alakja → spec. eset lineáris fv.
A mérési adatok hibákat tartalmaznak.
⇓
a paramétereknek is hibája lesz

Módszer → LEGKISEBB NÉGYZETEK

adott (x_i, y_i) $i = 1, \dots, N$
$y(x) = y(x, a_1, a_2, \dots, a_M)$
a_j paraméterek $j = 1, \dots, M$

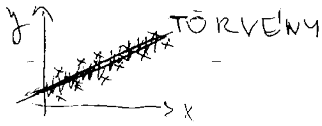
$$\min_{a_1, \dots, a_M} \left(\sum_{i=1}^{N} [y_i - y(x_i, a_1, \dots, a_M)]^2 \right)$$



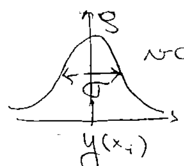
a távolságok négyzetösszegének minimumát kerestük

Miért ez a jó módszer?

- Maximális valószínűségű paraméterbecslés
- A paraméterek legvalószínűbb értékét kapjuk, ha
  - ↳ csak y_i hibáit vesszük figyelembe
  - ↳ * a hibák Gauss-eloszlásúak
  - ↳ ** a hibák függetlenek



$$y_i = y(x_i) + \sigma_i$$ ← hiba



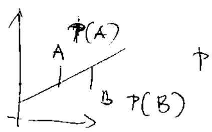
valószínűség Gauss-eloszlás
normál-

melyik a legvalószínűbb görbe

$$P \propto \prod_{i=1}^{N} \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma} \right)^2 \right] \Delta y \right\}$$

középen van a maximum és szimmetrikus

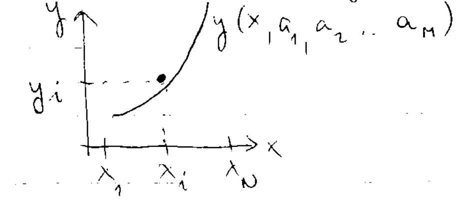
↳ ennek a minimuma



$P = P(A)P(B)$ → ez független eseményekkor igaz

J. M. Keynes: „Jobb ha az embernek nagyjából igaza van, mintha hajszálpontosan téved"

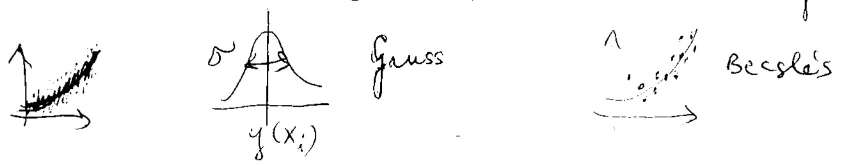
Legkisebb négyzetek:



$$\min_{a_1, \dots, a_M} \Big(\underbrace{\sum_{i=1}^{N} (y_i - y(x_i, a_1, a_2 \dots a_M))^2}_{\chi^2} \Big)$$ költségfv.

ha a 3 feltétel teljesül 1.* 2.** 3.***
(+ minden pontban azonos a hibák szórása) → 4.

akkor ez a maximális valószínűségű paraméterbecslés



valószínűség
$$P = \prod_{i=1}^{N} \exp\left(-\frac{1}{2}\left[\frac{y_i - y(x_i, a_1 \ldots a_M)}{\sigma}\right]^2\right) \Delta y$$

„maximum likelyhood" ↳ általánosabb

↖ egy pont helyének valószínűsége → Ω görbe

↑ összeszorzás a függetlenség miatt

(ha nem ezt a feltételt lennének, akkor pl. más eloszlása jönne ki a hibáknak és akkor nem a legkisebb négyzetek jönne ki)

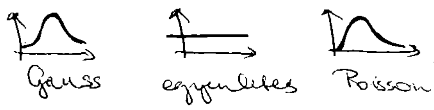
- azért ezt csináljuk, mert matematikailag könnyű kezelni
- amiket a fv.-ében mérünk azt pontosan be tudjuk állítani általában → egy feltétel ✓

nem szabad elfelejteni, hogy lehet x-nek hibája

- a hibák függetlensége, a méréstől függ oda kell figyelni
- Gauss-eloszlású hibákat ✓ mérünk a gyakorlatban: sokféle hatásból adódik a hiba

Tétel (centrális határeloszlás) ≈ ~~___~~ „sok" tetszőleges eloszlású valószínűségi változó összege Gauss-eloszlású lesz (Gauss ↳ normális (van szórás))

eloszlások pl.:



binomiális Maxwell

Keressük: $\max_{a_1 \ldots a_M} P(a_1 \ldots a_M)$

szig. mon. → max marad ne ⊖ jellel min

$$\min_{a_1 \ldots a_M}\left(-\ln(P)\right) \quad \min_{a_1 \ldots a_M}\left[-\ln\left(\prod_{i=1}^{N} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - y(x_i, a_1 \ldots a_M)}{\sigma}\right)^2\right] \Delta y\right)\right] =$$

$$= \min_{a_1 \ldots a_M}\left(-\sum_{i=1}^{N} \ln\left(\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y_i - y(x_i, a_1 \ldots a_M)}{\sigma}\right)^2\right] \Delta y\right)\right) =$$

$$= \min_{a_1\dots a_M} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\left(\frac{y_i - y(x_i;a_1\dots a_M)}{\sigma}\right)^2 + \cancel{N\ln\Delta y} \rightarrow \text{nem számít}$$

$\rightarrow$ nem számít

$$= \min_{a_1\dots a_M} \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - y(x_i;a_1\dots a_M)\right)^2$$ visszakaptuk a legkisebb négyzetek módszerét

ha ezek a feltételek, akkor a legnagyobb valószínűségű „legkisebb négyzetek"

ha $\sigma \rightarrow \sigma_i$ akkor finomabb becslést lehet kapni

χ^2 illesztés

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - y(x_i;a_1,\dots,a_M)}{\sigma_i}\right)^2$$ $\rightarrow$ ennek keressük a minimumát

súlyozott összeg

akkor kicsi a hiba az nagyobb súllyal szerepel...

figyelni kell a hibák becslésére

$a_1^*,\dots,a_M^*$ ahol a minimum van azt megkapjuk

$\hookrightarrow$ χ^2_{min}-et is megkapjuk a minimumban

optimális paramétereket

& van hibájuk

$\hookrightarrow$ utal arra, mennyire optimálisak, mennyire megbízható a becslés

Mutathat arra, hogy rossz a hibamodell vagy rossz a modell

χ^2_{MIN} keresése:

minimum feltétele, derivált $0 \Rightarrow$

(szükséges és itt elégséges is)

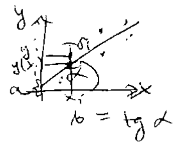
$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 0 \quad \forall\, j = 1\dots M$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 2\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{y_i - y(x_i;a_1,\dots,a_M)}{\sigma_i^2}\right)\frac{\partial y(x_i;a_1\dots a_M)}{\partial a_j} = 0$$ M db egyenlet

általában M egyenletből álló egyenletrendszer

FIZNUM II. 02.16.

Egyenes illesztése: $y = a + bx$



$$\chi^2(a,b) = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - y(x_i,a,b)}{\sigma_i}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - a - bx_i}{\sigma_i}\right)^2$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a} = 0 = -2\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i - (a + bx_i)}{\sigma_i^2}\, 1$$

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial b} = 0 = -2\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i - (a + bx_i)}{\sigma_i^2}\, b$$

$$S = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} \quad S_x = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2} \quad S_y = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i}{\sigma_i^2}$$

$$S_{xx} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2} \quad S_{xy} = \sum_{i=1}^{N} \frac{x_i y_i}{\sigma_i^2}$$

$$\left.\begin{aligned} S_y &= aS + bS_x \\ S_{xy} &= aS_x + bS_{xx} \end{aligned}\right\} \text{ két ismeretlenes lineáris egyenletrendszer}$$

$$\Delta = SS_{xx} - S_x^2 \qquad \boxed{a = \frac{S_{xx}S_y - S_x S_{xy}}{\Delta}} \qquad \boxed{b = \frac{SS_{xy} - S_x S_y}{\Delta}}$$

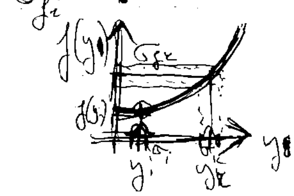
a, b hibáját is ki kell számolni

hibaterjedés törvénye (valószínűségi változók transzformációja): y_i-k hibaeloszlása ismert

$f(y_i)$ hibaeloszlása ?

nézzük a Gauss-eloszlást σ_i szórással

$\sigma_{f_i} = ?$



σ_i szélességű intervallumot transzformáljuk σ_{f_i}-vé

f'-vel van vmi köze

$$\sigma_{f_i}^2 = \sigma_i^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)^2$$

$$f = f(y_1 \dots y_i \dots y_N)$$

$$\boxed{\sigma_f^2 = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \left(\frac{\partial f}{\partial y_i}\right)^2}$$

$a(y_i)$ $b(y_i)$ ebből jön ki a paraméterek hibája

$$\boxed{\sigma_a^2 = \frac{S_{xx}}{\Delta}} \qquad \boxed{\sigma_b^2 = \frac{S}{\Delta}}$$

ha x_i-kben is vannak hibák:

$$\chi^2(a,b) = \sum_{i=1}^{N} \frac{(y_i - a - bx_i)^2}{\sigma_{y_i}^2 + b^2\sigma_{x_i}} \rightarrow \text{nem lineáris egyenletrendszerre vezet}$$

<u>általános lineáris legkisebb négyzetek módszere</u>

$y = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 \rightarrow \chi^2 \sim \sum (y_i - a_1 - a_2 x_i - a_3 x_i^2)^2$

deriváljuk a_3 szerint $\rightarrow$ lineáris marad a_k-ban

$y = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 + \dots + a_N x^{N-1} \rightarrow$ lineáris egyenletrendszer

N ismeretlennel $\rightarrow$ meg lehet oldani

x-ek helyére x tetszőleges fv.-e írható

$X_k(x) \leftarrow x$-nek tetszőleges (nemlineáris) fv.-e (amiben nincs illeszthető paraméter)

általános alak

$$y(x) = \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x)$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x_i)}{\sigma_i} \right)^2 \quad \text{ennek keressük a minimumát}$$

$a_1 \dots a_M$ fv.-ében

Belátható, hogy a sz.é. minimum lesz

$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = 0 \ \forall\ k = 1 \dots M \Rightarrow M$ ismeretlen M egyenlet

lineáris egyenletrendszer

$$0 = \frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} \cancel{(-2)} \left(y_i - \sum_{j=1}^{M} a_j X_j(x_i) \right) X_k(x_i) \qquad \forall\ k = 1 \dots M$$

$$\alpha_{kj} = \sum_{i=1}^{N} \frac{X_j(x_i) X_k(x_i)}{\sigma_i^2} \qquad \beta_k = \sum_{i=1}^{N} y_i X_k(x_i) \frac{1}{\sigma_i^2}$$

$$0 = \underbrace{\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} y_i X_k(x_i)}_{\beta_k} - \sum_{j=1}^{M} \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} a_j X_j(x_i) X_k(x_i)$$

$\rightarrow \alpha_{kj}$

$$0 = \beta_k - \sum_{j=1}^{M} \alpha_{kj} a_j \qquad \boxed{\sum_{j=1}^{M} \alpha_{kj} a_j = \beta_k} \qquad k = 1 \dots M$$

$\underline{\underline{\alpha}}\, \underline{a} = \underline{\beta}$ lineáris egyenletrendszer

megoldható $\rightarrow$ pl. Gauss-elimináció

a_j-ket megkapjuk $j = 1 \dots M$

$$\underline{a} = \underline{\underline{\alpha}}^{-1} \underline{\beta}$$

$$C_{jk} = [\alpha^{-1}]_{jk}$$

$$a_j = \sum_{k=1}^{M} \alpha_{jk}^{-1} \beta_k = \sum_{k=1}^{M} c_{jk} \left[\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i X_k(x_i)}{\sigma_i^2}\right]$$

paraméterek hibája (hibaterjedés)

$$\sigma^2(a_j) = \sum_{i=1}^{N} \sigma_i^2 \left(\frac{\partial a_j}{\partial y_i}\right)^2 =$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial y_i} = \sum_{k=1}^{M} \frac{c_{jk} X_k(x_i)}{\sigma_i^2}$$

$\alpha_{kl} = c_{kl}^{-1}$

$$\boxed{\sigma^2(a_j) = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} c_{jk} c_{jl} \left[\sum_{i=1}^{N} \frac{X_k(x_i) X_l(x_i)}{\sigma_i^2}\right] = \sum_{k=1}^{M}\sum_{l=1}^{M} c_{jk} c_{kl}^{-1} c_{jl} = c_{jj}}$$

Megj.: - lineáris egyenletrendszer megoldása

↳ Gauss-elimináció jó mert megadja az inverzet amiből megvannak a hibák

↳ nagyon sok paraméter

↳ numerikus hibák miatt más lineáris egyenletrendszer megoldó módszerek pl. SVD (szinguláris dekompozíció)

- gyakran nemlineárisnak tűnő problémák igazából lineárisak

pl.: $y(x) = a \cdot \exp(-bx)$ → formálisan nemlineáris

$z = \log(y(x))$ $c = \log(a)$

$z(x) = c - bx$ → lineáris probléma

de a hibák már nem Gauss-eloszlásúak

- még tovább általánosítható több dimenzióra

pontok param. vektor → skalár fv.

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{y_i - \sum a_k X_k(\underline{x}_i)}{\sigma_i}\right)^2$$

- paraméterek nemlineárisan szerepelnek

χ^2 → nemlineáris optimalizáció (minimumkeresés

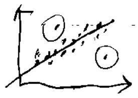
$\frac{\partial}{\partial a_k}$ → nemlineáris egyenletrendszer)

Levenberg-Marquardt-módszer (pl. GNUPLOT)

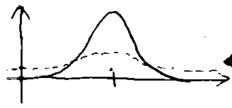
FIZNUM II. 02.23.

Robusztus becslés:

kiugró pontok (outliers)



Gaussi hiba modell problémája



egyéb külső tényezők miatt

ezeket általában kidobjuk, de vigyázni kell, mert felfedezéstől szabadulunk meg

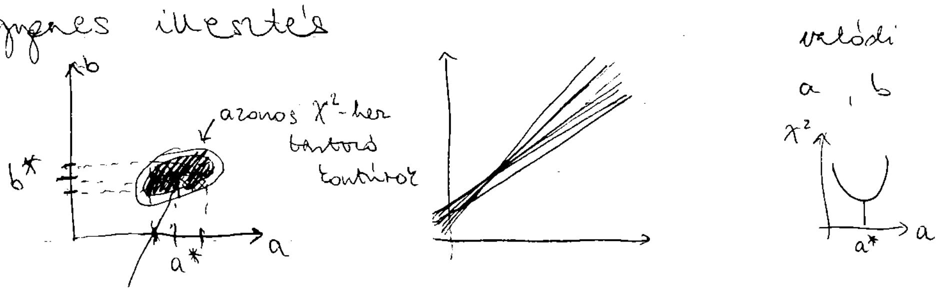
$$P \sim \prod_{i=1}^{N} \exp-\left(\rho(y_i, y(x_i, a_1 \ldots a_M))\right) \quad / -\ln$$

$$\sum_{i=1}^{N} \rho\left(\frac{y_i - y(x_i)}{\sigma_i}\right)$$

pl. $\sum_{i=1}^{N} |y_i - y(x_i)|$ robusztus becslés
kisebb a kiugró pontok járuléka

Konfidencia határok; tartományok:

pl.: egyenes illesztés



pl. 68,2% a valószínűsége, hogy a hibamodellt elfogadva ebben a tartományban vannak a paraméterek

a két paraméter hibája korrelál egymással

kiválaszthatunk egy tartományt a paramétereknek + kiszámolható a valószínűség, hogy ott lesznek

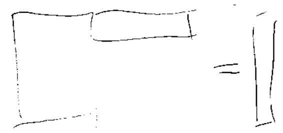
Kedves SzámítóGép!

03.02.

Lineáris egyenletrendszerek

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1N}x_N = b_1$$
$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2N}x_N = b_2$$
$$\vdots \qquad\qquad \vdots$$
$$a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + \dots + a_{MN}x_N = b_M$$

$a_{ij} \to \underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{b}$ (x_j, b_i)



ha (M=N) akkor van esély egyértelmű megoldásra

problémák: (M=N esettel foglalkozunk)

↳ mátrix szinguláris ⇒ ∄ m.o.

↳ matematikailag van m.o., de numerikusan a mátrix közel szinguláris

↳ kondíciószám $\mathrm{cond}\,\underline{\underline{A}}$

elszáll az algoritmus (pl. 0-val osztás) — lefut, de hibás (ellenőrzés behelyettesítéssel)

↳ memória, futásidő

ha $N \approx 10$ akkor műxik

ha $N \approx 100$ akkor duplapontosságot használjunk nagyjából ok

ha $N \approx 1000$ fokozott szingularitás, (sebesség)

futásidő $\sim N^3$

⇒ programcsomagok $\underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{b}$, $\underline{\underline{A}}\,\underline{x}_k = \underline{b}_k$, $\underline{\underline{A}}^{-1}$, $\det A$

$M < N$ (vagy degenerált egyenlet)

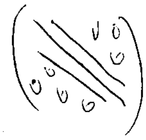
↳ megoldás altér keresése

↳ SVD - szinguláris dekonvolúció

$M > N$ → nincs megoldás, de lehet keresni legközelebbi pontot:

$$\min_{\underline{x}} \|\underline{\underline{A}}\,\underline{x} - \underline{b}\| \Leftrightarrow (\underline{\underline{A}}^T \underline{\underline{A}})\,\underline{x} = \underline{\underline{A}}^T \underline{b}$$
$(\ )^2$

• speciális mátrixok:



sáv ~

tridiagonális ~

töplitz ~

vandermonde ~

FIZNUM II. 03.09.

gyorsabb speciális megoldás
ritka mátrix → sok 0 a mátrixban
az idő kevesebb, mint N^3 pl. $\sim N^2$, $\sim N$

legegyszerűbbel kezdjük:

1) <u>Gauss-Jordan</u> módszer

$$\left(\underline{\underline{A}}\right)\left(\underline{x}\right) = \left(\underline{b}\right)$$

műveletek → a megoldás nem változik, ha
- megcseréljük két sort (b-ben is)
- megcseréljük két oszlopot (x-ben is cserélődik)
- lineáris kombináció: egyik sor := másik sor $\cdot\alpha + \beta\cdot$ egyik sor

$$\overset{\underline{\underline{A}}}{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 3 & 9 & 1 \end{pmatrix}} \overset{b}{\begin{pmatrix} 4 \\ 8 \\ 7 \end{pmatrix}}$$

egységmátrix alakra kell hozni
$\underline{\underline{A}}$-t → $\underline{\underline{A}}'\underline{x} = \underline{b}'$ → $\underline{\underline{E}}\,\underline{x} = \underline{b}''$ $\underline{x} = \underline{b}''$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -3 & -26 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ -8 \\ -29 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & -8 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ -8 \\ -5 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 4 \\ 8/3 \\ 5/8 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 17/8 \\ 17/12 \\ 5/8 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -17/24 \\ 17/12 \\ 5/8 \end{pmatrix}$$

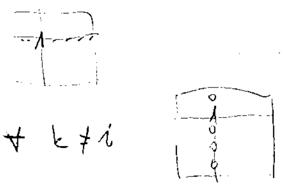
$\frac{8}{3} - \frac{10}{8} = \frac{64-30}{24} = \frac{34}{24} = \frac{17}{12}$ $4 - \frac{15}{8} = \frac{32-15}{8} = \frac{17}{8}$ $\frac{17}{8} - 2\frac{17}{12} = \frac{51-68}{24} = -$

első sort leosztjuk a_{11}-gyel
másodiktól N. sor: (i. sor) $- a_{i1} \cdot$ (1. sor)

(k+1) ← iterációs lépés

(I) $a_{kj}^{(k+1)} := a_{kj}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$; $b_k^{(k+1)} := b_k^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$;

(II) $a_{ij}^{(k+1)} := a_{ij}^{(k)} - a_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k+1)}$; $b_i^{(k+1)} := b_i^{(k)} - b_k^{(k)} a_{kj}^{(k+1)}$ $\forall\, k \neq i$



$k = 1 \ldots N$
N db elem

N db sor N oszlop

műveletigény $\sim N^3 = CN^3$
C → ezt még lehet javítani

2) <u>Visszahelyettesítéses Gauss-elimináció</u>

(A) → mátrix átalakítása / előkészítése
(B) → megoldás, visszahelyettesítés

FIZNUM II. 03.16

cél Ⓐ-ban a Δ mátrix alak.

 csak pivot sor alatt nullázzuk ki az oszlopot

$$\left.\begin{array}{l} r_{ik} := a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}; \\ \left.\begin{array}{l} a_{ij}^{(k+1)} := a_{ij}^{(k)} - r_{ik}\, a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} := b_i^{(k)} - r_{ik}\, b_k^{(k)} \end{array}\right\} \forall j = k+1 \dots N \end{array}\right\} k = 1 \dots N$$

$\approx \frac{1}{3} c N^3$ művelet

$$\begin{array}{l} a'_{11} x_1 + a'_{12} x_2 + \dots + a'_{1N} x_N = b'_1 \\ 0 \quad 0 \quad 0 \quad a'_{N-1,N-1} x_{N-1} + a'_{N-1,N} x_N = b'_{N-1} \\ 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad a'_{NN} x_N = b'_N \end{array}$$

$x_N = \frac{b'_N}{a_{NN}}$ → behelyettesítés

$x_{N-1} = \frac{1}{a_{N-1,N-1}} \left(b_{N-1} - a_{N-1,N} x_N \right)$ ⇓ ⋮

$x_j := \frac{1}{a_{jj}} \left(b'_j - \sum_i a_{ji} x_i \right)$ műveletigény N^2

összesen: $\left(\frac{1}{3} c N^3 + \frac{N}{?} N^2 \right)$ db művelet

ha egy átlóbeli elem 0 akkor sor- v. oszlopcsere kell

pontosabb / stabilabb eredmény, ha nem csak 0 pivot-nál végzünk cserét → a legnagyobb elem jó választás cserére

„normalizálás" kell

a sorok négyzetösszege alapján választunk

ezzel elkerülhető a numerikus hibák felhalmozódása

3) ha több különböző jobb oldal tartozik a mátrixhoz.

$\underline{A}\, \underline{x}^{(l)} = \underline{b}^{(l)}$

__Alsó - felső háromszög dekompozíció__ (LU- dekompozíció)

$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{L}}\, \underline{\underline{U}}$

$\underline{\underline{L}}$ ↓ Δ-mátrix

$\underline{\underline{U}}$ → Δ-mátrix

$\underline{\underline{A}}\, \underline{x} = \underline{b}$

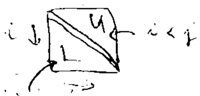
$= (\underline{\underline{L}}\, \underline{\underline{U}})\, \underline{x} = \underline{b}$

$\underline{\underline{L}} \underbrace{(\underline{\underline{U}}\, \underline{x})}_{y} = \underline{b}$ $\quad \left(\underline{\underline{L}}\, \underline{y} = \underline{b} \quad \underline{\underline{U}}\, \underline{x} = \underline{y} \right)$

két db lineáris egyenletrendszer, de $\underline{\underline{L}}$ és $\underline{\underline{U}}$ Δ-alakú
tehát csak visszahelyettesítés kell

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{11}} \qquad\qquad x_N = \frac{y_N}{u_{NN}}$$

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j\right] \qquad\qquad x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left[y_i - \sum_{j=i+1}^{N} u_{ij} x_j\right]$$



$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{L}}\,\underline{\underline{U}} \qquad \sum_k l_{ik} u_{kj} = a_{ij}$$

ha $i<j$, $\quad l_{i1}u_{1j} + l_{i2}u_{2j} + \dots + l_{ii}u_{ij} = a_{ij}$

ha $i>j$, $\quad l_{i1}u_{1j} + l_{i2}u_{2j} + \dots + l_{ij}u_{jj} = a_{ij}$

ha $i=j$, $\quad l_{i1}u_{1j} + l_{i2}u_{2j} + \dots + l_{ii}u_{jj} = a_{ij}$

$N^2 + N$ db ismeretlennek tűnik
↑ diagonális duplán van

legyen $l_{ii} = 1$ ∀i (N db-ot megmondunk)

Crout algoritmus:

```
j = 1..N {
i = 1..j {
      u_ij = a_ij - Σ_{k=1}^{i-1} l_ik u_kj ;
   }
i = j+1..N {
      l_ij = 1/u_jj (a_ij - Σ_{k=1}^{j-1} l_ik u_kj) ;
   }
}
```

$j=1 \quad i=1$

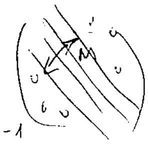
$u_{11} = a_{11}$

$i=2$

$l_{21} = \frac{1}{u_{11}}(a_{21} - 0)$

$\sim N^3$ db művelet

Általános-mátrix → LU → optimális
Vannak más felbontások speciális mátrixokra
pl. $\underline{\underline{A}}$ szimmetrikus és poz. szemidefinit ⇒ Cholesky felbontás → fele művelet
tridiagonális mátrix $\sim 5N$
sávdiagonális — $\sim M^2 N$



(M)
toeplitz $\sim N^2$ $\qquad a_{ij} = \alpha_i^{j-1}$
vandermonde $\sim N^2$ $\qquad a_{ij} = \alpha_{i-j}$
ritka ...

Speciális módszerek

Ritka mátrixok esetén → legkisebb négyzetek iteráció

$\underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{b}$ $\min_{\underline{x}} |\underline{\underline{A}}\,\underline{x} - \underline{b}|^2$

numerikus optimalizációba megy át

nem 0 elemek száma $\sim N$ ↳ konjugált gradiens módszer

és $\underline{\underline{A}}\,\underline{x}$ nem $\sim N^2$ műveletet igényel

és nagyon nagy mátrixok is invertálhatók

Szinguláris dekompozíció (SVD)

$$\underset{M\times N}{\underline{\underline{A}}} = \underset{M\times N}{\underline{\underline{U}}} \underbrace{\begin{pmatrix} w_1 & & 0 \\ & w_2 & \\ 0 & & \ddots\ w_N \end{pmatrix}}_{DIAG} \underline{\underline{V}}^T$$

$\underline{\underline{U}}$ oszlopor tog onális

$\underline{\underline{V}}^T$: ortogonális $N\times N$

↑ pl. ha több egyenlet van

minden mátrix a szinguláris is felbontható így

(LAPACK programcsomagban ⇄ DGESVD, DGESDD → gyorsabb)

$\underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{V}} \begin{pmatrix} 1/w_1 & & \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/w_N \end{pmatrix} \underline{\underline{U}}^T$ probléma, ha $w_i \approx 0$

ha $w_i = 0$, akkor $\frac{1}{w_i} := 0$ → töröljük a szinguláris „egyenleteket" ↳ gépi pontosság szerint

Iteratív módszerek

$\underline{\underline{A}}\,\underline{x} = \underline{b}$

$(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{A}})\,\underline{x} = \underline{x} - \underline{b}$ $\underline{x}_{k+1} = (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{A}})\,\underline{x}_k + \underline{b}$ ha $\|\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{A}}\| < 1$ akkor konvergál

iteráció + dekompozíció : Gauss - Seidel eljárás

Gyököt pontosítása iterációval

$\underline{\underline{A}}(\underbrace{\underline{x} + \delta\underline{x}}_{\underline{x}_1}) = \underline{b} + \delta\underline{b}$ $\underline{\underline{A}}\,\delta\underline{x} = \delta\underline{b}$

$\underline{\underline{A}}\,\underline{x}_1 - \underline{b} = \delta\underline{b}$ → újabb lin. egy. rendszer → $\delta\underline{x}_1$

$\underline{x}_2 = \underline{x}_1 - \delta\underline{x}_1$

lehet iterálni egyre jobb lesz

LU-dekompozícióval a javító lépések $\sim N^2$ műveletigényűek

Beadandók emailben: **1,** $\underline{\underline{A}}\ (M\times N)$ · $\underline{v}$; beolvas $\underline{\underline{A}}$, $\underline{v}$; $\underline{x} = \underline{\underline{A}}\,\underline{v}$; kiír $\underline{x}$

2, Gauss elimináció **sorcserével**, oszlopcserével **3,** $\underline{N}$ változós polinomill.

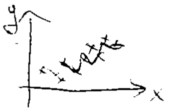
(általános lineáris legkisebb négyzetek módszere)

$f(x) = \sum_i a_i x^{i-1}$ $y(x_1,x_2,x_3) = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 + a_4x_1x_2 + a_5x_1x_3 + a_6x_2x_3 + a_7x_1^2 + a_8x_2^2 + a_9x_3^2$

Interpoláció és extrapoláció

$x_1, x_2 \dots x_N$ pontok

$y_1, y_2 \dots x_N$ értékek



$f(x) = ?$ $x \neq x_i$ pontban

fv. illesztés: modell → paraméterei

interpoláció: minden ponton menjen át az interpolált fv.

nem fontos a pontos fv. alak

↳ köztes pontok kiszámítása

↳ "átmintavételezés"

pl. galaxis spektrumok, vöröseltolódás

sima fv.-t tételezünk fel az interpolációnál

vagy rögzítjük a fv. családot pl. polinom

kétdimenzióban példa képek átméretezése

ha $x_1 < x < x_N$ interpoláció

ha kívül van x, akkor extrapolációról beszélünk

vannak jól és rosszul interpolálható fv.-ek

N pontra polinom fektethető $(N-1)$-edrendű

N szabad paraméter

magasrendű interpoláció ⇝ nagyon "hullámozhat"

kétféleképp interpolálhatunk: → globális → minden ponton átmenő fv.

→ lokális → részekre bontjuk: $N = ck$ k pontra interpolálunk

Polinom interpoláció:

1. kiszámoljuk a polinom együtthatóit 2. behelyettesítünk

↳ közvetlenül y_i-ből számoljuk y-t

↳ numerikusan hatékony ↳ becslés a hibára

globális polinom interpoláció Lagrange-formulával

$y = P(x) =$ $\qquad y = f(x) = f(x_1, x_2, \dots y_1, y_2 \dots, x)$

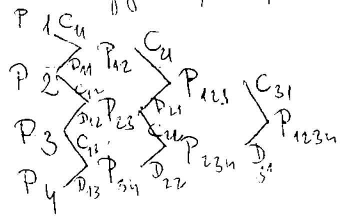
$$y = \frac{(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_N)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdots(x_1-x_N)} y_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_N)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)\dots(x_2-x_N)} y_2 + \dots + \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{N-1})}{(x_N-x_1)(x_N-x_2)\dots(x_N-x_{N-1})} y_N$$

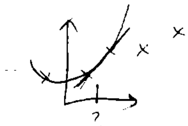
átmegy minden (x_i, y_i) ponton $P(x_i) = y_i$

Neville-algoritmus: rekurzió a Lagrange-formula előállítására

$$P_{i(i+1)\dots(i+m)} = \frac{(x - x_{i+m}) P_{i(i+1)\dots(i+m-1)} + (x_i - x) P_{(i+1)(i+2)\dots(i+m)}}{x_i - x_{i+m}}$$

polinom, ami átmegy $i, i+1, \dots i+m$ ponton





$C_{m,i} \equiv P_{i(i+1)\dots(i+m)} - P_{i(i+1)\dots(i+m-1)}$

$D_{m,i} \equiv P_{i(i+1)\dots(i+m)} - P_{(i+1)(i+2)\dots(i+m)}$

$C_{m+1,i} = \frac{(x_i - x)(C_{m,i+1} - D_{m,i})}{x_i - x_{i+m+1}} \qquad D_{m+1,i} = \frac{(x_{i+m+1} - x)(C_{m,i+1} - D_{m,i})}{x_i - x_{i+m+1}}$

jó, ha x_k konvergál, tehát a hiba $(x_{k+1} - x_k)$-val becsülhető

Polinom együtthatói:

$y_i = c_0 + c_1 x_i + c_2 x_i^2 + c_3 x_i^3 \dots c_N x_i^N$

→ ① Lagrange-formula

$x = 0 \quad y_i(x_i = 0) = c_0$

vonjuk ki c_0-t mindkét oldalból

② osszuk le a polinomot x_i-vel $\Rightarrow c_1 + c_2 x_i + c_3 x_i^2 \dots c_N x^{N-1}$

$\Rightarrow c_1$

→ $N+1$ db ismeretlen c_j együttható

lineáris egyenletrendszer megoldás

$\underline{\underline{A}}\,\underline{c} = \underline{y}$

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^N \\ 1 & x_2 & x_2^2 & & x_2^N \\ 1 & x_3 & \vdots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \\ 1 & x_{N+1} & x_{N+1}^2 & & x_{N+1}^N \end{pmatrix}$$

spec. mátrix

Vandermonde

a megoldás ~N' -bel skálázik

Polinommal nem jól interpolálható fv.-ek esetén

<u>Interpoláció racionális törtfüggvényekkel</u>

$$R_m(x) = \frac{P_\mu(x)}{Q_\nu(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + \dots + p_\mu x^\mu}{q_0 + q_1 x + \dots + q_\nu x^\nu} \quad \begin{matrix} \leftarrow \mu+1 \\ \nwarrow \nu+1 \end{matrix}$$

$\Big\} \; \mu + \nu + 2 - 1 = m + 1$

egy szabadsági fok kiesik az arány. miatt

$\mu+\nu+1$ szabad paraméter

vannak hasonló módszerek, mint a Lagrange-formula

ha divergál akkor polinommal nem interpolálható

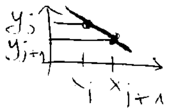
$\Rightarrow$ rac. fv.

ha nem divergál, de komplex síkra kiterjesztve pólusa van a valós tengely közelében $\Rightarrow$ rac. fv.

pl: $\frac{1}{1+x^2}$  pólus $x = \pm i$

lokális interpoláció $\rightarrow$ szakaszonként

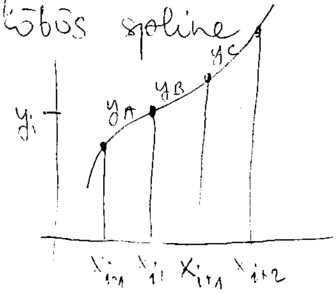
„spline”

lineáris interpoláció 

$$y = a y_j + b y_{j+1}$$

$$y = \frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j} y_j + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} y_{j+1}$$

köbös spline



$$\left.\begin{matrix} y_A(x_i) = y_i \\ y_B(x_i) = y_A(x_i) \end{matrix}\right\} \mathrm{I.}$$

$$\frac{\partial y_A}{\partial x}(x_i) = \frac{\partial y_B}{\partial x}(x_i) \quad \mathrm{II.}$$

$$\frac{\partial^2 y_A}{\partial x^2}(x_i) = \frac{\partial^2 y_B}{\partial x^2}(x_i) \quad \mathrm{III.}$$

$y = A y_j + B y_{j+1} + C y_j'' + D y_{j+1}''$ ha adott lenne $\forall$ pontban y_i''

$$y = \underbrace{\frac{x_{j+1} - x}{x_{j+1} - x_j}}_{A} y_j + \underbrace{\frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j}}_{B} y_{j+1} + \underbrace{\frac{1}{6}(A^3 - A)(x_{j+1} - x_j)^2}_{C} y_j'' + \underbrace{\frac{1}{6}(B^3 - B)(x_{j+1} - x_j)^2}_{D} y_{j+1}''$$

teljesül, hogy I., III. ha megnézzük két oldalról

II ⇒ egyenletrendszer

$$\frac{1}{6}(x_j - x_{j-1})\, y''_{j-1} + \frac{x_{j+1}-x_{j-1}}{3}\, y''_j + \frac{x_{j+1}-x_j}{6}\, y''_{j+1} =$$
$$= \frac{y_{j+1}-y_j}{x_{j+1}-x_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{x_j - x_{j-1}}$$

lineáris egyenletrendszer y''_j-re $(\forall j)$

összesen N-2 db egyenlet

két értéket szabadon választható: $y''_1 = 0$ $y''_N = 0$

vagy $y'_1 = \alpha$ $y'_N = \beta$

Speciális lineáris egyenletrendszer

$$\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y'' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \ \end{pmatrix}$$

tridiagonális

Több dimenziós interpoláció

→ rácson vannak a pontok?

cellázások / tesselation (Voronoi / Delanney)

→ négyzetrácsot vesszük

⇓

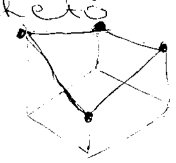
irányonként egydimenziós interpoláció

$z(x, y)$

$z_{ij}(x_i, y_j)$ lokális / globális

bilineáris interpoláció

4 pontra nem illeszthető sík



$$t = \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

$$u = \frac{y - y_j}{y_{j+1} + y_j}$$

$$z = (1-t)(1-u)\, z_{ij} + t(1-u)\, z_{i+1\,j} + u(1-t)\, z_{i\,j+1} + u t\, z_{i+1\,j+1}$$

felírhatók simasági feltételek az első és másodrendű parciális deriváltakra

túl sok szabad paraméter marad

minden pontban: $\frac{\partial z}{\partial x}$, $\frac{\partial z}{\partial y}$, $\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y}$ meg kell adni

Közönséges differenciálegyenletek numerikus megoldása

$\frac{dy}{dx} = f(x,y)$

függvényegyenlet

Keressük $y(x)$-et, amelyre a derivált $f(x, y(x))$ alakú

$\Delta y = y_{x+1} - y_x$ $\qquad \frac{y_{x+1} - y_x}{\Delta x} = f(x,y)$

$y_{x+1} = y_x + \Delta x\, f(x,y)$

„léptetés"

elsőrendű $\frac{dy}{dx} = f(x,y)$

$\frac{d^2y}{dx^2} + q(x)\frac{dy}{dx} = r(x)$ másodrendű d.e.

minden magasabb rendű átírható csatolt elsőrendű diffegyenletrendszerre:

$\frac{dy}{dx} = z(x)$ csatolás

$\frac{dz}{dx} = r(x) - q(x)z(x)$

tiszta algebrai kifejezések → nem szerepel benne derivált

általános alak közönséges d.e. rendszerekre:

$\frac{dy_k(x)}{dx} = f_k(x, y_1 \ldots y_K) \qquad k = 1 \ldots K$

↳ ezt kell szimultán módon megoldani → „léptetni"

peremfeltételek pl. kezdeti feltételek

ha nem kezdeti értékrendszer van → iterációs módszerek

„léptetés" „Euler-módszer"

$y(x+h) = y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n)$ egy db elsőrendű kezdeti érték probléma

ez csak közelítés (analitikusan $h \to 0$)

h kicsi, $\neq 0$ legyen

$y_{n+1} = y(x_n + h) \qquad x_{n+1} = x_n + h \qquad y_n = y(x_n)$

$y(x+h) = y(x) + 1\frac{dy}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2y}{dx^2}h^2 + \ldots$

idáig pontos $\qquad$ hibatag $O(h^2)$

$\frac{dy}{dx} = f(x,y)$

Runge-Kutta módszerek:

$y_{n+1} = y(x+h) = y(x) + Ah f_0 + Bh f_1$

$f_0 = f(x_n, y_n) \quad f_1 = f(x_n + Ph, y + Qh)$

Taylor sor: $f_1 = f(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) Ph + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} Qh + O(h^2)$ ($\frac{dy}{dx} = f_0$)

$y(x_n + h) = y(x_n) + (A+B) h f(x_n, y_n) + Bh^2 P \frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) + Bh^2 Q \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n) f(x_n, y_n) + O(h^3)$

?

$y(x_n + h) = y(x_n) + h f(x_n, y_n) + \frac{h}{2} y''(x) + O(h^3)$

$y'' = \left(\frac{dy}{dx}\right)' = f'(x,y) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx}$

$y(x_n + h) = y(x_n) + h f(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_n, y_n) f(x_n, y_n)\right) + O(h^3)$

$$\left.\begin{aligned} A + B &= 1 \\ BP &= \frac{1}{2} \\ BQ &= \frac{1}{2} \end{aligned}\right\}$$ ezek kell legyenek így másodrendig pontos

pl: másodrendű Runge-Kutta: $A = 0 \quad B = 1 \quad P = \frac{1}{2} \quad Q = \frac{1}{2}$

$y(x_n + h) = y(x_n) + h f\left(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)\right)$

Heun-módszer: $A = \frac{1}{2} \quad B = \frac{1}{2} \quad Q = 1 \quad P = 1$

$y(x_n + h) = y(x_n) + \frac{h}{2}\left(f(x,y) + f(x+h, y + hf(x,y))\right)$

Negyedrendű Runge-Kutta:

$k_1 = h f(x_n, y_n)$

$k_2 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$

$k_3 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right)$ 4 db fv. kiértékelés

$k_4 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + k_3\right)$

$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5)$

Adaptív lépéshossz változtatás

$y_n \to y_{n+1}$ igazi

$y_n \to y^*_{n+1} + \Delta(h)$

számolt

hibát mérése: ugyanazt a lépést h-val és $\frac{h}{2} + \frac{h}{2}$-vel

$\Delta_1 \approx |y_1 - y_2| < \Delta_0 \leftarrow$ elvárt hiba

FIZNUM. II. 04.06.

mért hiba ~~...~~ Δ_1, elvárt hiba Δ_0

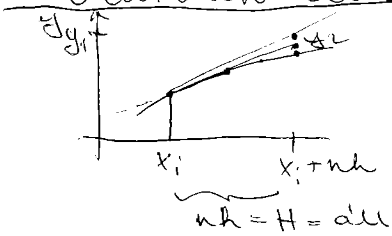
szükséges lépés Δ_0-hoz $\rightarrow \left(\frac{h_0}{h}\right)^5 = \left|\frac{\Delta_0}{\Delta_1}\right|$ $h_0 = h\left|\frac{\Delta_0}{\Delta_1}\right|^{1/5}$

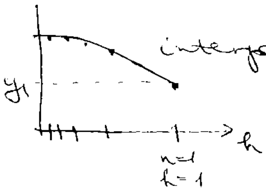
$h_0 \geq h \Rightarrow$ továbblépés h_0-lal

$h_0 \leq h \Rightarrow$ új lépés h_0-lal

04.20.

Richardson-extrapoláció





$y_{i+H}(h)$ $h \to 0$

akkor jó, ha az integrálandó d.e. „simán" viselkedik → interpoláló fv. hibáját figyeljük

Bulirsch-Stoer módszer:

Richardson extrapoláció + módosított középponti módszer

$z_0 = y(x)$

$z_1 = z_0 + hf(x, z_0)$ az előző értéket felhasználja

$z_{m+1} = z_{m-1} + 2hf(x+mh, z_m)$ ← egy fv. kiértékelés kell hozzá

$y(x+H) = y_n = \frac{1}{2}(z_n + z_{n-1} + hf(x+H, z_n))$

másodrendű

csak ~~...~~ páratlan rendű hibákat tartalmaz

$y(x+H) = y_n$

$y(x+H) = \dfrac{4y_n - y_{n/2}}{3}$ ← negyedrendig pontos

~ átlagosan két lépéshez 3 fv. kiértékelés kell

1.5 ↔ 4 / lépés (RK4)

Implicit módszerek:

$y' = -cy$ $y = e^{-cx}$ $c > 0$

Euler-módszer: $y_{n+1} = y_n + hy_n' = \underbrace{(1-ch)}_{< -1} y_n$

$h > \frac{2}{c}$

$u' = 998u + 1998v$ $u(0) = 1$ $v(0) = 0$

$v' = -999u + (-1999)v$

$u = 2e^{-x} + e^{-1000x}$

$v = -e^{-x} + e^{-1000x}$

Stabilitás feltétele: $h < \frac{2}{1000}$

$h < \frac{2}{c}$ $\Leftarrow$ instabil

implicit → Euler-lépés „visszafelé"

$y_{n+1} = y_n + h y'_{n+1}$

$y' = -cy$

$y_{n+1} = y_n - hcy_{n+1}$

$y_{n+1} = \frac{y_n}{1+ch}$ $\forall$ h-ra stabil

↳ lineáris egyenletrendszermegoldás minden lépésben

ha a d.e. nem lineáris, akkor nemlineáris egyenletrendszert kell megoldani → iteratív módszerek

↓ linearizálás, szemiimplicit Euler-módszer

Runge-Kuttához is vannak implicit módszerek:

↳ Rosenbrock, Kaps-Rentrop

Richardson-extrapolációhoz is

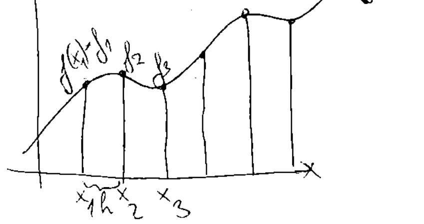
↳ Bader-Deuflhard

Numerikus integrálok

(kvadratúra)

$I = \int_a^b f(x)\,dx$

módszerek:



1) kiszámolt fv.-értékek súlyozott összege
2) interpolálunk a pontok között, ismert integrálú fv.-ekkel
3) fv.-bázison kifejtés
bázis: analitikusan integrálható fv.-ek

$$f(x) = \sum_{i=0}^{N} c_i T_i(x)$$
$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N} c_i \underbrace{\int_a^b T_i(x)\,dx}_{R_i}$$
(van olyan $R_{i+1} = F(R_i, R_{i-1} \dots)$)

- zárt / nyitott formulák
  ↳ integrálási határokon kiintegrálható a fv.

Zárt Newton - Cotes formulák

trapéz szabály: $\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{2} f_1 + \frac{1}{2} f_2\right] + O(h f'')$
első rendű polinomokig egzakt
3 pont → másodrendű polinomokig egzakt
interpoláció felírható
$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{3} f_1 + \frac{4}{3} f_2 + \frac{1}{3} f_3\right] + O(h^5 f^{(4)})$$ Simpson - formula

magasabb rendű módszerek → csak ha elég sima a fv.
levezetés
trapéz módszer (magasabb rendnél is jó)
2 pontos $\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx = h[\alpha f_1 + \beta f_2]$
alakban keressük
egzakt lesz elsőrendű polinomokra
$\int ax + b = a\int x + b\int 1$
$f(x) = x$ $f(x) = 1$
$$\frac{x_2^2}{2} - \frac{x_1^2}{2} = h[\alpha x_1 + \beta x_2] \qquad \underbrace{x_2 - x_1}_{=h} = h[\alpha + \beta]$$
egyenletrendszerből
$\alpha, \beta = \frac{1}{2}$

feltösszegzett trapéz szabály
$$\int_{x_0}^{x_{N-1}} f(x)\,dx = h\left[\frac{1}{2} f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-2} + \frac{1}{2} f_{N-1}\right] + O\left(\frac{(b-a)^3 f^{(2)}}{N^2}\right)$$

hiba becsléséhez: $I_1 = S_1 = (b-a)\left(\frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b)\right)$
$$S_2 = \left(\frac{b-a}{2}\right) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$
$$I_2 = \frac{1}{2} I_1 + S_2$$

$I_{N+1} - I_N \to$ pontosság

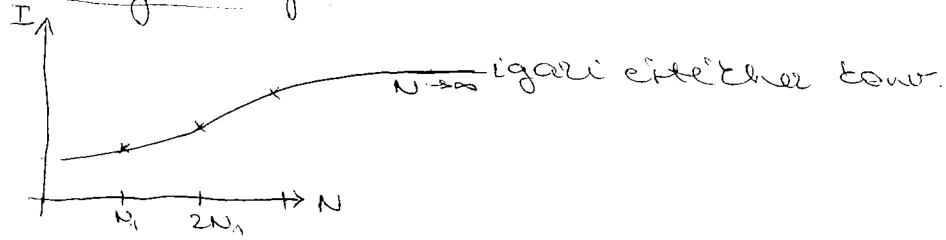
hibatagok kiejtése felösszegzés során

$I = \frac{4}{3} I_{2N} - \frac{1}{3} I_N \to$ hiba $\mathcal{O}\left(\frac{1}{N^4}\right)$-es lesz

belátható hogy ez ugyanaz mint a felösszegzett Simpson

további kombinációkkal magasabb rendű módszerek

Romberg integrálás



$h = \frac{b-a}{N}$ -t ábrázolva $h \to 0$ esetén $I \to$ igazi érték

extrapoláció

Nyílt formulák

→ határon v. valamely belső pontban nem értékelhető ki a fv.

$f_i = f(x_i)$ $\quad f_{3/2} = f\left(\frac{x_1 + x_2}{2}\right)$

pl. felösszegzett középponti szabály

$$\int_{x_0}^{x_{N-1}} f(x)\,dx = h\left(f_{3/2} + f_{5/2} + \dots + f_{N-\frac{1}{2}}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

→ integrálási határ $\pm\infty$

változó helyettesítés $\quad x = \frac{1}{t} \quad dx = \frac{-1}{t^2}\,dt$

$a \cdot b > 0 \qquad \int_{a=-\infty}^{b} f(x)\,dx = \int_{\frac{1}{b}}^{\frac{1}{a}} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt$

→ határon vagy a tartományban integrálható singularitás van

változó helyettesítés

pl: $0 < \gamma < 1 \qquad (x-a)^{(\gamma-1)} \qquad x = t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a \quad \Leftrightarrow t = (x-a)^{1-\gamma}$

$dx = \frac{1}{1-\gamma} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}}\,dt$

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_0^{(b-a)^{1-\gamma}} \frac{1}{1-\gamma} t^{\frac{\gamma}{1-\gamma}} f\left(t^{\frac{1}{1-\gamma}} + a\right) dt$$

Gauss formulák

↳ kétszeres hibarend érhető el $\left(\frac{1}{N^2} \to \frac{1}{N^4}\right)$

↳ nem egyenletesen osztjuk fel a tartományt

"jól" választjuk meg az osztópontokat

↳ bizonyos fv. ~~osztályokra működik~~

↳ egzakt vagy közelítés

pl. $\int_{-1}^{1} \frac{\exp(-\cos^2 x)}{\sqrt{1-x^2}}\, dx$ ← $f(x)$ ← pszeudo vagy polinommal jól közelíthető

← $W(x)$ súlyfv. [redacted] → integrálható szingularitást tartalmaz

$$\int_a^b W(x) f(x) \simeq \sum_{j=1}^{N} w_j f(x_j)$$

$W(x)$-hez felírható egy polinom bázis: $p_0(x), p_1(x) \ldots p_j(x)$

$W(x)$-re nézve ortogonálisak

0, ha $i \neq j$ $= \langle p_i, p_j \rangle = \int_a^b p_i(x) W(x) p_j(x)\, dx$

polinomok gyökei → x_j

$$\sum_j \underbrace{p_i(x_j)}_{Q_{ij}} w_j = \int_a^b W(x) p_i(x) \delta_{i0} dx \quad \rightarrow \underline{Q w} = \begin{pmatrix} \int W(x) p_0(x) dx \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

lineáris egyenletrendszer megoldása → w_j

polinomok meghatározása: rekurzió

$p_{-1}(x) = 0$

$p_0(x) = 1$

$p_{j+1}(x) = (x - a_j) p_j(x) - b_j p_{j-1}(x)$

$a_j = \frac{\langle x p_j, p_j \rangle}{\langle p_j, p_j \rangle} \qquad b_j = \frac{\langle p_j, p_j \rangle}{\langle p_{j-1}, p_{j-1} \rangle}$

pl. $W(x) = 1 \qquad -1 < x < 1$

$(j+1) p_{j+1} = (2j+1) x p_j - j p_{j-1}$ Legendre-polinomok

Gauss-Csebisev $\quad W(x) = (1-x^2)^{-1/2} \qquad -1 < x < 1$

Laguerre $\quad W(x) = x^{\alpha} e^{-x} \qquad \alpha = 0, 1, 2$ stb. $\qquad 0 < x < \infty$

Hermite $\quad W(x) = e^{-x^2} \qquad -\infty < x < \infty$

Jacobi $\quad W(x) = (1-x)^{\alpha} \cdot (1-x)^{\beta} \qquad -1 < x < 1 \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{R}$

Többdimenziós integrálok

↳ az osztópontok száma $N \sim n^d$ ← dimenziók

↳ az integrálási határok megadása probléma

↳ néha szimmetriákkal redukálhatók a dimenziók

→ ha a határfelület explicit módon adott

3D $\iiint_V dx\,dy\,dz\, f(x,y,z) = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz\, f(x,y,z)$

↳ Newton - Cotes formula

↳ több dimenziós Gauss-formulák

→ Monte Carlo módszerek

véletlenszámok pl. $x^2+y^2<R^2$

$$\int f\,dV \approx V\langle f\rangle \pm V\sqrt{\frac{\langle f^2\rangle-\langle f\rangle^2}{N}} \leftarrow \Theta\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

$$\langle f\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$

importance sampling $\rho(x,y,z)=e^{5z}$ $ds = e^{5z}\,dz$

kell adott eloszlású ← ↳ nem egyenletes véletlen

véletlenszámgenerátor

reguláris rács ⇒ szisztematikus hibák

↳ sz. g. nem igazi véletlen

szemirandom rácsok $\Theta\left(\frac{1}{N}\right)$ elérhető