

1. előadás: Bevezetés a parc. diff.-ek numerikus megoldásába.

Bevezető óra, hogyan is oldjunk meg egy problémát numerikusan. Példa: hővezetés. Hővezetés egyenletét származtatjuk. Analitikusan megoldjuk különböző határfeltételekre. Parciális differenciákra bontás. Explicit, implicit módszer. Stabilitás vizsgálata és összehasonlítása. Implicit módszer: egyenletrendszerek megoldása kell. Erre egy jó példa: LU dekompozíció.

2. előadás: Lineáris algebra. (Mivel minden parcdiffnél kell ezért ez megkerülhetetlen)

Lineáris algebra és egyenletrendszerek megoldásai. Milyen feladatok fordulnak elő? Gauss elimináció vs. LU dekompozíció. Kondíció szám. Szinguláris mátrix, erre egy példa a Hilbert mátrix. Szinguláris Érték Dekompozíció (SVD). Konjugált gradiens módszer.

3. előadás: 1D-s numerikus integrálás.

Trapéz szabály. Simpson-formula és általánosítása. Kiterjesztett trapéz ill Simpson formula. Az előző formulák hibatagjainak származtatása. Középpontos-szabály. Euler-Maclaurin felösszegzési formula. Neville-algoritmus. Romberg-integrálás. Ortogonális polinómok és a Gauss-Legendre módszer.

4. előadás: Magasabb dimenziós integrálás.

Monte-Carlo módszer. A közelítés pontossága. A Monte-Carló módszer javítása: Helder-eljárás, Sobol-sorozat, Gray-kód. A szórás csökkentésének módszerei.

5. előadás: ????

6. előadás: Speciális függvények. Diffegyenletek megoldása.

Lánc törtek. Lánc tört kifejtés. Gamma-függvény. Euler-féle béta függvény. Hibafüggvény. Eloszlások: Poisson, Student-t, F-eloszlás, Binomiális. Bessel-függvények. Diffegyenletek megoldása: Burlisch-Stoer-módszer. Kemény "stiff" egyenletek. Hibabecslés. Módosított középponti módszer. Elliptikus integrálok.

7. előadás: Peremérték feladatok.

Shooting-módszer. Relaxációs-módszer. Példa: Hidrogén-molekula ion elliptikus koordináta rendszerben.

8. előadás: Parciális diffegyenletek megoldási módszerei.

Sok-sok módszer felsorolva: MWR, Galjorkin, véges-elem...stb. stb. Prekondicionáló mátrix. Gauss-Siedel-módszer. Successive-overrelaxation. Multigrid-módszer.

Előadás	Dátum	Állapot
1.	2012.02.16	OK
	2012.02.23	elmaradt
2.	2012.03.01	OK
3.	2012.03.08	OK
	2012.03.15	március 15.
4.	2012.03.22	OK
	2012.03.29	elmaradt
	2012.04.05	tavaszi szünet
	2012.04.12	elmaradt
5.	2012.04.19	hiányzik
6.	2012.04.26	OK
7.	2012.05.03	OK
	2012.05.10	Eötvös nap
8.	2012.05.17	OK

Modern num módszerek

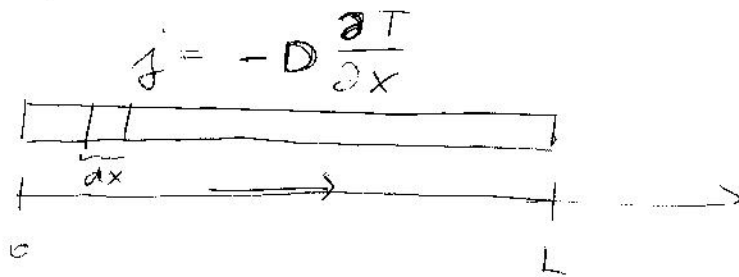
1. előadás

(2012 - 02 - 16)

<http://aipad.elte.hu/~bene>

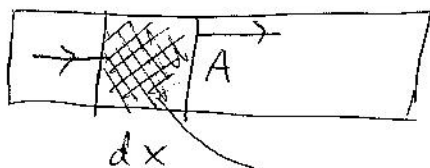
1 beadandó lesz, vizsgán köbéli a programról, módszerekről. C, C++ programozás

Fővertes rúdmes mentén.



j hőáram

dx vastagságú rétegben
hőgyan változik



$$C \cdot A \cdot dx \cdot \frac{\partial T}{\partial x} = -D \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+dx}$$

beérő energia
kieső energiával változik

$$+ D \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x =$$

$$= -C A A - D \left(\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+dx} - \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x \right)$$

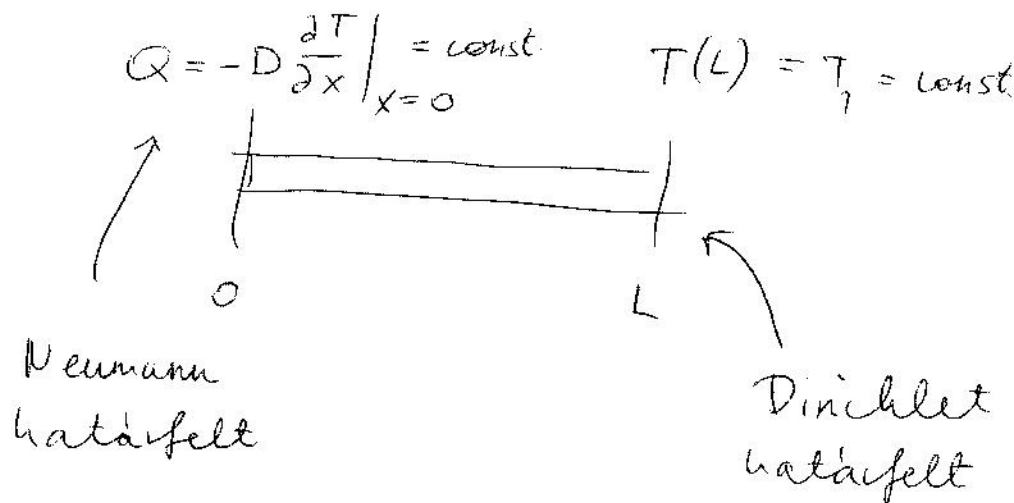
$$\approx \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx \quad (\text{sorfejtés után})$$

1

tehát:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \underbrace{\frac{D}{cA}}_K \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (\text{hővezetés egyenlete})$$

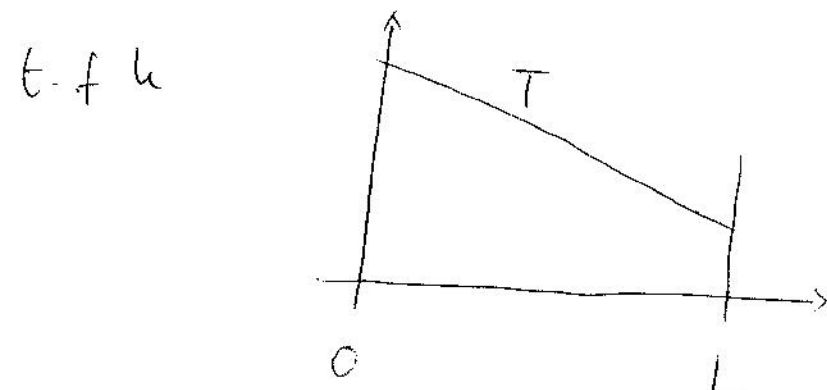
határérték:



(van még Fourier-féle pl, az előző két határfelt lineár kombinációja)

Analitikus megoldás

Kerdesi hőmérséklet eloszlás



be fog állni
egy egyensúly

régcsedményben

$t \rightarrow \infty$ -re

$$\frac{\partial T}{\partial t} = 0 \quad (\text{stacionárius megoldás})$$

$$t \rightarrow \infty \text{ -ben } \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \rightarrow \frac{\partial T}{\partial x} = a$$

$$\rightarrow T = ax + b \quad (\text{lineáris összefüggés hat. esetben})$$

határfeltételből

$$T_1 = a \cdot L + b \quad (T(L) = T_1)$$

$$a = -\frac{Q}{D} \quad b = T_1 + \frac{Q}{D} L$$

Leválasztjuk a stat. megoldást:

$$\mathcal{T} = T - (ax + b)$$

(hat. feltételből)

$$\boxed{\mathcal{T}(x=L) = 0}$$

$$\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 \mathcal{T}}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = -\frac{Q}{D}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (ax + b) = a = -\frac{Q}{D}$$

$$\rightarrow \boxed{\left. \frac{\partial \mathcal{T}}{\partial x} \right|_{x=0} = 0}$$

tehát homogén határfeltételeket kapunk,
és egy olyan használt trükk inhomogén
hat. felt. esetén

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = K \frac{\partial^2 Y}{\partial x^2}$$

separálható az egyenlet $Y = A(t) \cdot B(x)$
 újul vissza: (sajátérték egyenlet)

$$A' B = K A B'' \quad \rightarrow \quad \frac{A'}{A} = K \frac{B''}{B} = \lambda \text{ konst.}$$

$$Y \sim e^{\lambda t} \cdot B(x) \leftarrow \frac{A'}{A} = A \lambda - \text{ból}$$

$$B' = \frac{\lambda}{K} B \quad B = e^{rx}$$

$$r^2 e^{rx} = \frac{\lambda}{K} e^{rx} \quad r = \pm \sqrt{\frac{\lambda}{K}}$$

ha $\lambda < 0 \rightarrow$ megoldások $\sin, \cos$ függvények

$$B = e^{\pm i \sqrt{\frac{|\lambda|}{K}} x}$$

vagy tetszőleges lin kombinációból:

$$B_1 = \cos\left(\sqrt{\frac{|\lambda|}{K}} x\right) \quad B_2 = \sin\left(\sqrt{\frac{|\lambda|}{K}} x\right)$$

jelölés $\sqrt{\frac{|\lambda|}{K}} = k$

Teljes megoldás:

$$Y = e^{-K\xi^2 t} \left\{ \begin{array}{l} \cos \\ \sin \end{array} \right\} (\xi x)$$

mészük a hat. feltételeket!

$$\left. \frac{\partial Y}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \rightarrow \cos(\xi x)' = \left[-\xi \sin(\xi x) \right]_{x=0} = 0$$

$\sin(\xi x) \leftarrow$ ez nem lesz
nulla tehát $\sin$ kizár-
ható (nem tudja a hat.
feltételt)

Most csak 1 módusról beszélünk

$$Y(x=L) = 0 \rightarrow e^{-K\xi^2 t} \cos(\xi L) = 0$$

$$\Rightarrow \xi L = (2n+1) \frac{\pi}{2}$$

$$\boxed{\xi = \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{L}}$$

Egyenlet általános megoldása:

$$Y = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \cdot e^{-K\left(n+\frac{1}{2}\right)^2 \frac{\pi^2}{L^2} t} \cos\left(\left(n+\frac{1}{2}\right) \frac{\pi}{L} x\right)$$

g_n a kezdeti feltétellel hat. meg

$t=0$:

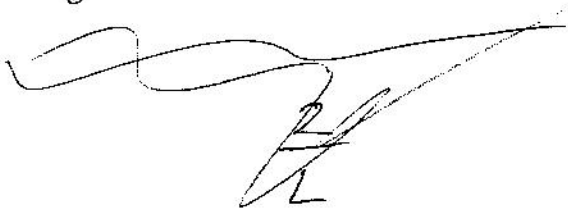
Touin van

$$\underbrace{T_0(x) - (ax+b)}_{\text{hurditi felt}} = \sum_{n=0}^{\infty} g_n \cos\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{L}x\right)$$

hurditi
felt

(hülböörö rajatstihellen taitio
s. f-ek merölegeseh Sturmville)

$$g_n = \int_0^L \cos\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{L}x\right] dx$$

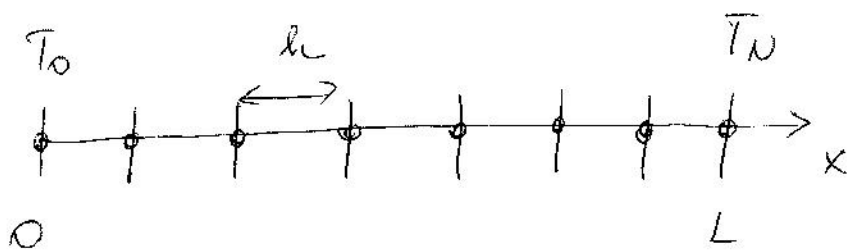


$$g_n = \left(\frac{2}{L}\right) \int_0^L [T_0(x) - ax+b] \cos\left[\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{L}x\right] dx$$

$$\int_0^L \cos\left(\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\pi}{L}x\right) dx$$

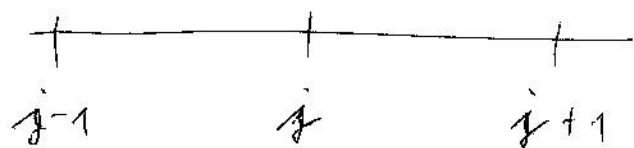
Nézzük most numerikusan!

diszkrétizáljuk az egyenletrendszert



$$T(x) \rightarrow T_i \quad N = \frac{L}{h}$$

deriváltakat diszkrétizált változóra kell!



$$T_{i-1} = T((i-1)h) = T(ih - h)$$

j h környéki sorfejtés

$$T(ih - h) \approx T(ih) + \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=ih} (-h) +$$

$$\frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x=ih} (-h)^2$$

$$\cancel{T_{j+1}} \quad T_{j+1} = T(ih + h) \approx T(ih) + \frac{\partial T}{\partial x} h + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} h^2$$

második deriváltat kihasználva:

$$T_{j-1} + T_{j+1} = 2T_j + \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x=jh} h^2 + O(h^2)$$

vagyis:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{j-1} + T_{j+1} - 2T_j}{h^2} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{másodrendig kicsi}}$$

tehát:

$$\boxed{\frac{dT_j}{dt} = K \frac{T_{j-1} + T_{j+1} - 2T_j}{h^2}}$$

Valamint mondani kell a határfeltételről:

$\Rightarrow T_W = \text{const.}$ tehát $j=1 \dots N-1$ mert N -re const

Ha a határfeltétel lineáris

$$\frac{\partial T}{\partial x} \approx \frac{T_1 - T_0}{h} \quad \text{ez nagyobb hibát ad!}$$

$$\frac{T(h) - T(0)}{h} \approx \frac{\downarrow}{T(0) + \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_0 h + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_0 h^2 - T(0)} =$$

$$= \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{x=0} h$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{O(h)} \quad \text{et romboló hűvelés}$

$$T_1 = T_0 + \frac{\partial T}{\partial x} h + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} h^2 + O(h^3)$$

$$T_2 = T(2h) = T_0 + \frac{\partial T}{\partial x} (2h) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} (2h)^2 + O(h^3)$$

éltünk, hogy h^2 -es tagokat kiértékeljük
 hogy a végtő hűvelés jobban legyen

normalizál I. -et 4-el és vonjuk ki
 "ből (I. - II.)

$$\rightarrow 4T_1 - T_2 = \underbrace{4T_0 - T_0}_{3T_0} + \frac{\partial T}{\partial x} \underbrace{(4h - 2h)}_{2h} + O(h^3)$$

$$\boxed{\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{4T_1 - T_2 - 3T_0}{2h} + O(h^2)}$$

ez már
 arányrendű
 pontos!

határ feltétel:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{4T_1 - T_2 - 3T_0}{2h} + O(h^2) = -\frac{Q}{D}$$

Differenzialit rendszet megoldása.

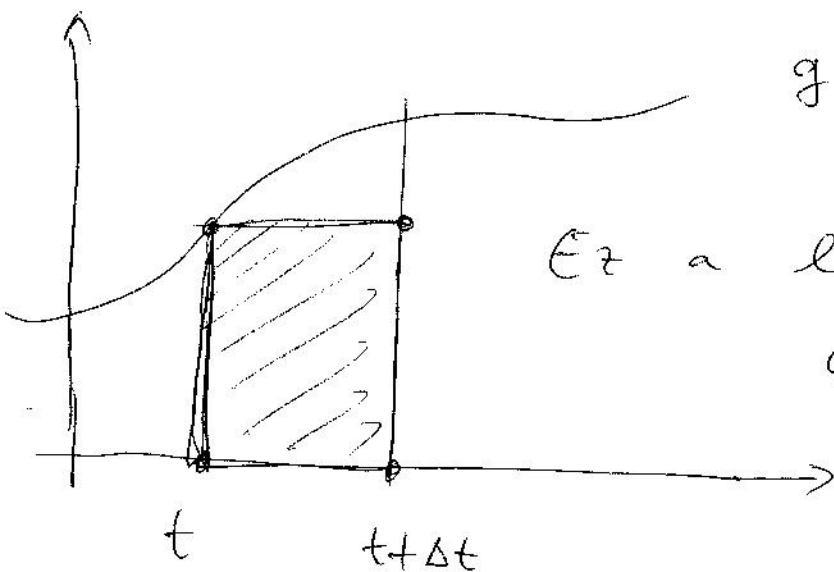
$$f(t) \quad \frac{df}{dt} = g(f)$$

legyen Δt lépéshossz, kiintegráljuk az egyenletet:

$$\int_t^{t+\Delta t} \frac{df}{dt} dt = \int_t^{t+\Delta t} g(f(t)) dt$$

$$f(t+\Delta t) - f(t) = \underbrace{\int_t^{t+\Delta t} g(f(t)) dt}$$

arra vessük vissza hogy
hogyan integráljuk



Ez a leggyakoribb
Euler módszer

$$\left[f(t+\Delta t) - f(t) \right] \Delta t = \int_t^{t+\Delta t} g(f(t)) dt$$

popen parancs $\rightarrow$ az $t+\Delta t$ idő lépésközénél
 az egyből a gyúrlót abbahagyva lehet

de nem lehet aláírni
 $\rightarrow$ instabilitás!

Stabilitás

$$t = n \cdot \Delta t$$

$T_j^{(n)}$ ← időbeli
 ↑ térbeli

$$T_j^{(n+1)} = T_j^{(n)} + \frac{D}{h^2} \left(T_{j-1}^{(n)} + T_{j+1}^{(n)} - 2T_j^{(n)} \right) \Delta t \quad \text{iteráció}$$

Neumann-féle stabilitásvizsgálat
 (határfeltétel nem kellene)

vektor alakban:

$$\underline{T}^{(n+1)} = \begin{pmatrix} 1 - 2\frac{D\Delta t}{h^2} & \frac{D\Delta t}{h^2} & & \\ \frac{D\Delta t}{h^2} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 - 2\frac{D\Delta t}{h^2} \end{pmatrix} \underline{T}^{(n)}$$

a mátrix sajátértékei alapján meg
 hogy stabil-e a rendszer!

$$T_j^{(n)} \sim e^{ijK}$$

(megnéztük ilyen
 alakban)

oszilláló hiba
 mi történik vele?

$$T_j^{(n)} \rightarrow T_j^{(n)} + \underbrace{\varepsilon^{(n)} e^{ijK}}_{\text{hiba}}$$

Vizsgáljuk a hibát az idő függését:

$$\varepsilon^{(n+1)} e^{ijK} = \varepsilon^{(n)} \left(e^{ijK} + \frac{D\Delta t}{h^2} e^{ijK} (-4) \sin^2\left(\frac{K}{2}\right) \right) \Rightarrow$$

$$e^{i(j-1)K} + e^{i(j+1)K} - 2e^{ijK}$$

$$e^{ijK} (e^{iK} + e^{-iK} - 2)$$

$$= -4 \sin^2\left(\frac{K}{2}\right) e^{ijK}$$

$$\Rightarrow \varepsilon^{(n+1)} = \varepsilon^{(n)} \left[1 - \frac{4D\Delta t}{h^2} \sin^2\left(\frac{K}{2}\right) \right]$$

$$1 - \frac{4D\Delta t}{h^2} > -1 \quad \text{mindenkori} \\
\text{abszolút en-} \\
\text{telben}$$

feltétel:

$$\Delta t < \frac{h^2}{2D}$$

Explicit Euler -
séma

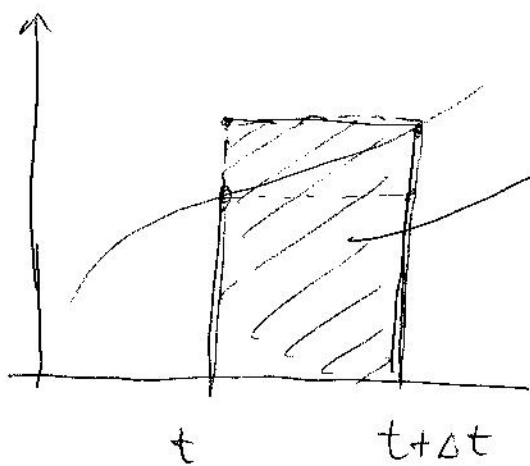
stabilitás -
feltétele

Implicit Euler-módor

eddig

$t + \Delta t$

$$f(t + \Delta t) - f(t) = \int_t^{t + \Delta t} g(f(t)) dt \approx g(f(t)) \Delta t$$



implicit módorban
ezt az egen területet
híveim
azaz $g(f(t + \Delta t))$ alatti
terület

így:

$$T_j^{(n+1)} = T_j^{(n+1)} + \frac{D}{h^2} \left(T_{j-1}^{(n+1)} + T_{j+1}^{(n+1)} - 2 T_j^{(n+1)} \right) \Delta t$$

Mézzül így a stabilitást:

$$\varepsilon^{n+1} = \varepsilon^n - \frac{4D\Delta t}{h^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\right) \cdot \varepsilon^{n+1}$$

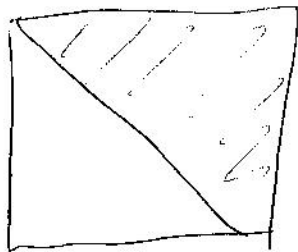
ebból:

$$\varepsilon^{n+1} = \frac{1}{1 + \frac{4D\Delta t}{h^2} \sin^2\left(\frac{k}{2}\right)} \cdot \varepsilon^{(n)}$$

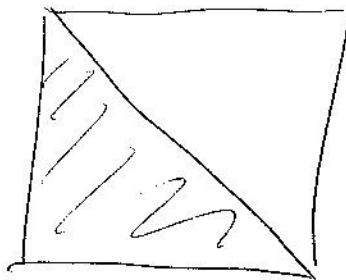
→ itt a hibatarag mindig lecseng
azaz implicit módszer feltételként stabil!

De nagyméretű lin. egyenletrendszer
kell megoldani!

N^3 művelettel mátrix felbontható:



U



L

az LU felbontás

LU Felbontás

ehhöz

$$\underline{U}(\underline{L} \mid \underline{I}) = \underline{b}$$

~~U~~

y meghatározása:

$$\underline{U} \underline{y} = \underline{b}$$

①

$$U_{N,N} \cdot y_N = b_N \rightarrow y_N = \frac{b_N}{U_{N,N}}$$

②

$$U_{N-1,N-1} \cdot y_{N-1} + U_{N-1,N} y_N = b_{N-1}$$

③

$$② \quad u_{j,j} \cdot y_j + u_{j,j+1} \cdot y_{j+1} + \dots + u_{j,N} y_N = b_j$$

$$L_{1,1} T_1 = y_1 \rightarrow T_1 = \frac{y_1}{L_{1,1}}$$

$$L_{2,2} T_2 + L_{2,1} T_1 = y_2$$

LU decomp $\sim N^3$ -el skálázódik

Határ feltétel megváltoztatja a mátrixot is és a T vektort is.

(itt hosszasan felírja a határ feltétel vissza helyettesítését)

Tridiagonális mátrix és amíg ilyenkor a sima Gauss-Elimináció nagyon gyors, N -el skálázódik

Általában érdemes kitanulni a mátrix speciális alakját, ha gyorsan kellene megoldani az egyenletrendszert
pl: ritka mátrix

Rithamátvirkni oskotið er dæmið að
hú. ~~rithamátvirkni~~ er konjugált -

Gradiens móðren $N \log N$ -
gjörðin

Modern numerikus
számítás

2. előadás

(2012-03-01)

Lin. egyenletrendszer

függő kiválasztás, dupla pontosság
max néhány száz x néhány száz

Gauss-elimináció N^3 művelet

mátrixok spekulatív számítások helyett kihasználni a problémák között.

$$\textcircled{1} \quad \underline{A} \underline{x} = \underline{b} \quad \textcircled{2} \quad \underline{A} \underline{x}_j = \underline{b}_j$$

$$\textcircled{3} \quad \underline{A} \underline{A}^{-1} = \underline{I} \quad \textcircled{4} \quad \det \underline{A} = ?$$

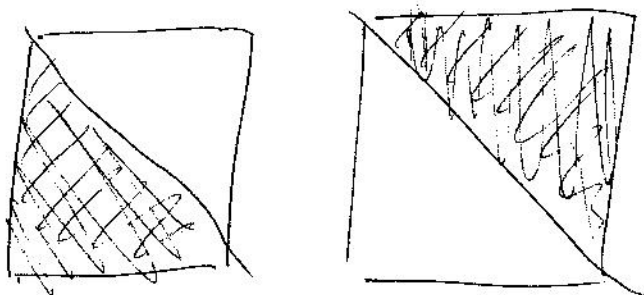
$$\textcircled{5} \quad |\det A| \ll 1 \quad (\text{singuláris mátrix})$$

$\rightarrow$ SVD (singuláris értékek felbontása)

$\textcircled{6}$ Nagy ritkamatricák

①-④: pl LU dekompozíció

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



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

②-re sokkal jobb mint a Gauss elim ha már egyszer felvontottuk N^2 -el bármilyen x_j -re meg tudjuk oldani

③-ra is sokkal jobb, Gaussal N^4 lenne

④ $\det \underline{\underline{A}} = (\det \underline{\underline{L}}) \cdot (\det \underline{\underline{U}})$ gyorsan lehet vele determinánst számolni

Elvettentővel

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_{n-1} x^{n-1}$$

Orthogonális polinomok esetén

$$\int_0^1 x^j f(x) dx = \int_0^1 x^j \sum_{k=0}^{n-1} x^k a_k dx =$$

$$= \sum_{k=0}^{N-1} a_k \left[\frac{x^{j+k+1}}{j+k+1} \right]_0^1 = b_j$$

$$= \left[\sum_{k=0}^{N-1} a_k \frac{1}{j+k+1} \right] = e_j$$

Lineáris
egyenletrendszer

Hilbert-mátrix

van analitikus inverz mátrix!

Ha közvetlenül oldjuk meg bajban vagyunk

→ sajátértékek gyorsan tartanak nullához

→ hogy a kondíció száma $C = \left| \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \right|$

→ erősen singuláris mátrix

Singuláris érték dekompozíció

$$A = U \cdot S \cdot V^+ \rightarrow \text{diagonális}$$

↑ ↑
unitér mátrixok

$$UU^+ = 1 \quad \text{és} \quad VV^+ = 1$$

$$\underline{A} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \boxed{\underline{U}} & \begin{array}{c} \diagup \emptyset \\ \underline{S} \\ \diagdown \emptyset \end{array} & \boxed{\underline{V}^+} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{c} n \times n \\ m \times m \end{array} \quad \text{ha } n > m$$

$$\underline{A} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \boxed{\underline{U}} & \begin{array}{c} \diagup \emptyset \\ \underline{S} \\ \diagdown \emptyset \end{array} & \boxed{\underline{V}^+} \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{c} n < m \end{array} \quad \text{ha } n < m$$

Jordan -féle normálalakba lehet
normál bázisban alakítani mátrixot

$$\underline{A} = \underline{B} \begin{pmatrix} \boxed{} & & \\ & \boxed{} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \underline{B}^{-1}$$

Diagonalizálható : azaz normál-
mátrix

SVD dekompozíció bármely mátrixra igaz!

Beverteinké let is mátrixot

$$\underline{\underline{N}} = \underline{\underline{A}} \underline{\underline{A}}^+$$

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{A}}^+ \underline{\underline{A}}$$

tulajdonság: $\underline{\underline{M}}^+ = \underline{\underline{M}}$ $\underline{\underline{N}}^+ = \underline{\underline{N}}$

$\searrow \swarrow$

önadjungáltak!

→ unitér traktóal

diagonalizálhatóak

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{U}} \cdot \underline{\underline{D}}_1 \cdot \underline{\underline{U}}^+ \rightarrow \text{unitér el}$$

$$\underline{\underline{N}} = \underline{\underline{V}} \cdot \underline{\underline{D}}_2 \cdot \underline{\underline{V}}^+ \rightarrow$$

$$\Rightarrow \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{U}}^+ \underline{\underline{A}} \underline{\underline{V}}$$

(Leventi's Bene konjugátum)

$$\underbrace{\underline{\underline{S}}^+ \underline{\underline{S}}}_{\underline{\underline{D}}_1} \underline{\underline{S}} = \underline{\underline{S}} \underline{\underline{D}}_2$$

Belehatáro, hogy $\underline{\underline{S}}$ diagonális

$$|\det A| = \underbrace{|\det U|}_1 \cdot |\det S| \cdot \underbrace{|\det V^+|}_1 = \prod_{i=1}^n |s_{ii}|$$

$\swarrow$
 mert
 unitárak

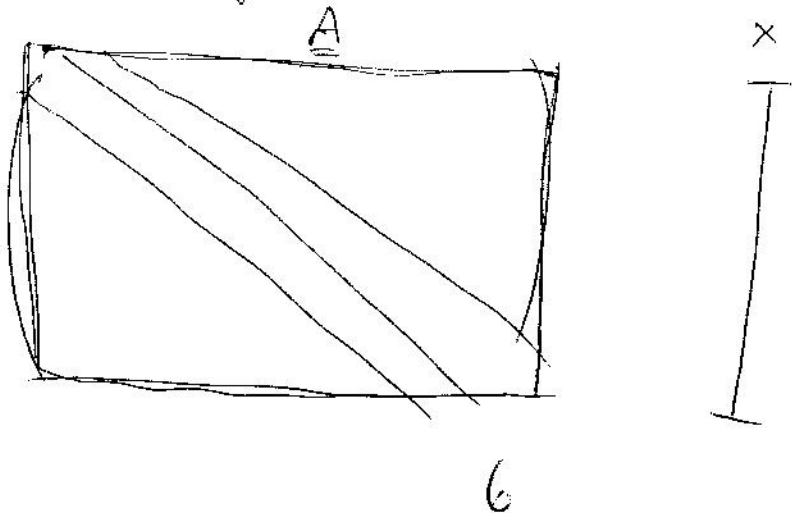
végtelemt mértékkel helyettesíthető
 (WTF??)

unitár mátrix nem változtatja a vektor
 hosszát $|W| = |X|$

$\rightarrow$ ezzel már ismert lehet a liha
 arány nem egyértelmű megoldást ad

Konjugált gradiens módszer

pl. tridiagonális rendszer:



$$A_{i,i-1} \cdot x_{i-1} + A_{i,i} x_i + A_{i,i+1} x_{i+1}$$

önkesen csak 2 db sorra ^{hell} ~~történik~~
és nem N , a többi sorok nulla

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{A}}^T \quad \underline{\underline{A}} \text{ valós}$$

pozitív definit mátrix

$$\underline{x}^T \underline{\underline{A}} \underline{x} > 0 \rightarrow \text{saját értékek pozitívak}$$

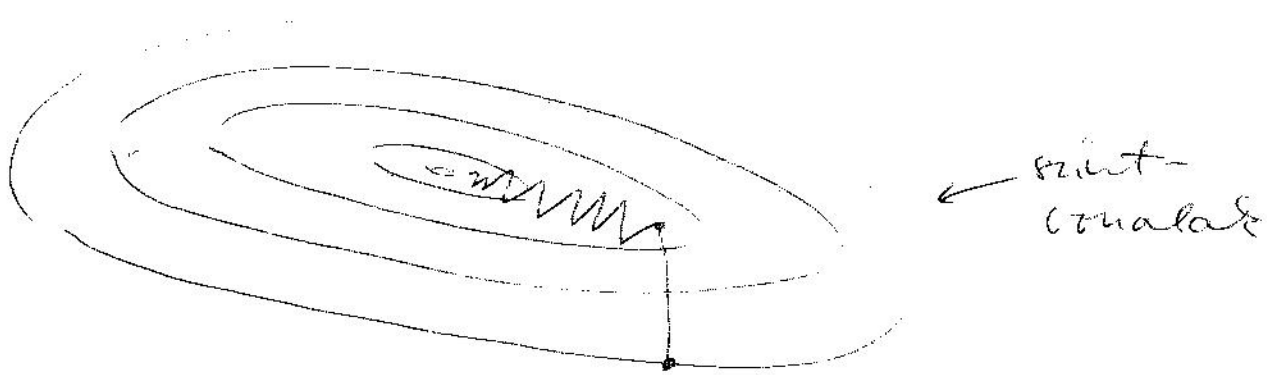
$$\underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b}$$

$$\left(\frac{1}{2} \underline{x}^T \underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b}^T \underline{x} \right)_{\min} \quad \swarrow \text{ennek a minimuma megoldja } \underline{\underline{A}} \underline{x} = \underline{b} \text{ egyenlet megoldását}$$

mert éppen a legkisebb érték irányába

$$\underline{\nabla} \left(\frac{1}{2} \underline{x}^T \underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b}^T \underline{x} \right) = \underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b}$$

$$\underline{x} = \underline{x}_0 + \alpha (\underline{\underline{A}} \underline{x} - \underline{b})$$



lille-callorin jutunk be véglegesre
lépésben a minimumba. Ez nem jó!

$$\underline{x} = \underline{x}_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \dots + \alpha_N p_N$$

↓
legyen nulla

$$- \sum_{i=1}^N \alpha_i (\underline{b}^T \cdot p_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \cdot \alpha_j \cdot p_i^T A p_j = p_s$$

ha $i \neq j$ $p_i^T A p_j = 0$

$$= \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (p_i^T A p_i) \alpha_i^2 - (\underline{b}^T p_i) \alpha_i$$

deriválunk α_i -re szerint

$$\alpha_i = (p_i^T A p_i)^{-1} \cdot (\underline{b}^T p_i)$$

választok egy irányt véletlen majd
egy konjugált irányt keresve a mini-
mumba.

p -ket hogyan választam meg?

$$1) \underline{p}_1 = \underline{b} - \underline{A} \cdot 0$$

$$2) \underline{p}_2 = \underbrace{(\underline{b} - \alpha_1 \underline{A} \underline{p}_1)}_{\underline{r}_1} + \beta_1 \underline{p}_1$$

β -t abból a feltétellel, hogy

$\underline{p}_2$ legyen konjugált irány

$$\underline{p}_1^T \underline{A} \underline{r}_1 + \beta_1 \underline{p}_1^T \underline{A} \underline{p}_1 = 0$$

$$3) \underline{p}_3 = \underline{r}_2 + \beta_2 \underline{p}_2$$

//

$$\underline{b} - \alpha_1 \underline{p}_1 - \alpha_2 \underline{A} \underline{p}_2$$

Tulajdonságok:

$$\boxed{\underline{r}_i^T \underline{p}_j = 0}$$

$$\text{ha } j \leq i$$

$$\boxed{\underline{x}_i^T \underline{x}_j = 0}$$

ha nem szimmetrikus vagy nem pozitív-
definit akkor ez a minimalizációs
feladat így nem jó, de hasonló
eljárásra isra lehet vezetni

[P]BCG - módszer: (prekondicionált)
bárhogyan gradient
módszer
(nem vektorra mérni!)

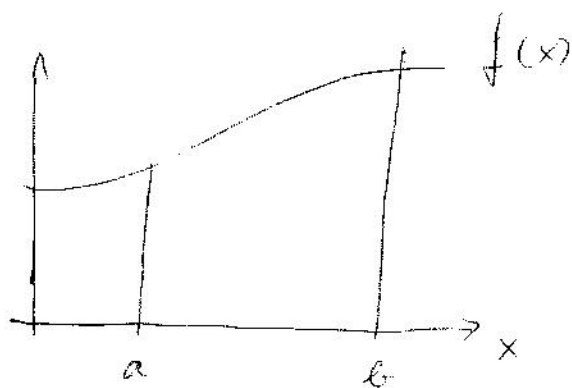
Imre fekete 1989 @ gmail.com

Numerikus módszerek

3. előadás

(2012-03-08)

Integrálás



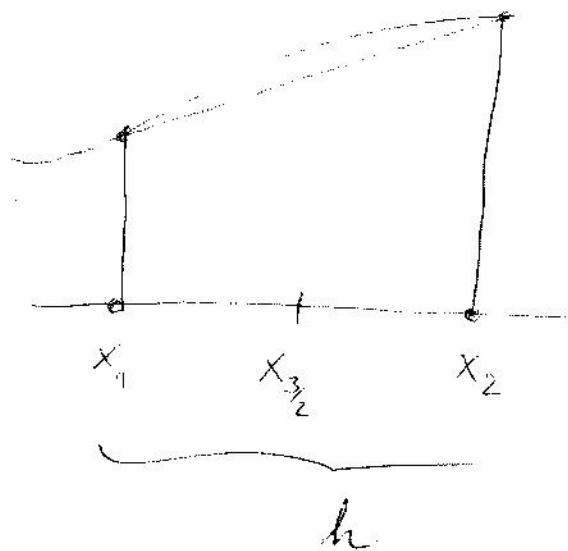
$$\int_a^b f(x) dx = ?$$

ez egyenértékű azzal,

hogy: $\frac{dy}{dx} = f(x) \quad y(a) = 0$

Trapez szabály

hátréppont körül
fejtsünk ki sorba!



$$f(x_1) = f(x_{3/2}) - \frac{h}{2} f'(x_{3/2}) + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2}\right)^2 f''(x_{3/2}) - \frac{1}{6} \left(\frac{h}{2}\right)^3 f'''(x_{3/2})$$

konvergencia sugár legyen nagyobb mint
a használt lépéshöz! (ahol akkor van
értelme)

$$f(x_2) = f(x_{3/2}) + \frac{h}{2} f'(x_{3/2}) + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{2} \right)^2 f''(x_{3/2}) - \frac{1}{6} \left(\frac{h}{2} \right)^3 f'''(x_{3/2}) + \dots$$

Trapez szabályból

$$\frac{h}{2} (f_1 + f_2) = \frac{h}{2} \left(2f(x_{3/2}) + \left(\frac{h}{2} \right)^2 f'' + \frac{1}{12} \left(\frac{h}{2} \right)^4 f^{(4)} + \dots \right)$$

$$\frac{h}{2} \rightarrow x - x_{3/2}$$

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) dx = \underbrace{(x_2 - x_1)}_h \cdot f_{3/2} + \underbrace{\left[\frac{(x - x_{3/2})^2}{2} \right]}_{\emptyset} \Bigg|_{x_{3/2} - \frac{h}{2}}^{x_{3/2} + \frac{h}{2}}$$

általánosán:

$$\int_{x_{3/2} - \frac{h}{2}}^{x_{3/2} + \frac{h}{2}} \frac{(x - x_{3/2})^{2k+1}}{2k+1} = \frac{2}{2k+1} \left(\frac{h}{2} \right)^{2k+1}$$

páratlan
tagok kiesnek!

Telát

Taylor sorlat

$$\int f(x) dx = (x_2 - x_1) f_{3/2} + \frac{1}{2} f''_{3/2} \cdot \frac{2}{3} \left(\frac{h}{2} \right)^3$$

Trapezoidál: $h f_{3/2} + \frac{h^2}{8} f''$

Telát a hiba: $\mathcal{O}(h^3)$

Simpson formula

$$\int f(x) dx = h \left[\frac{1}{3} f_1 + \frac{4}{3} f_2 + \frac{1}{3} f_3 \right] + \mathcal{O}(h^5 f^{(4)})$$

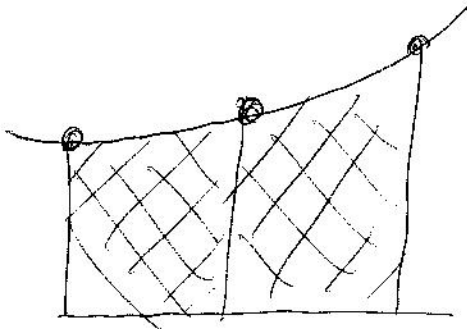
Lagrange interpoláció:

$$\begin{aligned} f(x) \approx & f_1 \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} + f_2 \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} + \\ & + f_3 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} \end{aligned}$$

$-h^2$

$\rightarrow 2h^2$

$2h^2$



nemlálóhat kiintegráljuk

$$\int_{x_1}^{x_3} (x - x_2)(x - x_3) dx = \frac{x^3}{3} - (x_2 + x_3) \frac{x^2}{2} + x_2 x_3 x \Big|_{x_1}^{x_3} =$$

$$= \frac{(x_2 + h)^3}{3} - \frac{(x_2 - h)^3}{3} - (x_2 + x_3) \frac{(x_2 + h)^2 - (x_2 - h)^2}{2} + x_2 \cdot x_3 \cdot 2h$$

$$= \frac{2 \cdot 3 x_2^2 h}{3} + \frac{2h^3}{3} - \cancel{(2x_2 + h)} x_2 \cdot h + x_2(x_2 + h)2h$$

$$= \frac{2}{3} h^3$$

→ tehát az első tag a Lagrange interpolációból

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x) = \left(\frac{h}{3} \cdot f_1 \right) \leftarrow \text{ezt már láttuk eddig}$$

hőrepro tag

$$z = x - x_2$$

helyettesíté

$$(x - x_1)(x - x_3) = (z + h)(z - h) = z^2 - h^2$$

$$\int_{-h}^h (z^2 - h^2) dz = \left. \frac{z^3}{3} - h^2 z \right|_{-h}^h = \frac{2}{3} h^3 - 2 h^3 = -\frac{4}{3} h^3$$

$$\int f(x) dx = \frac{h}{3} f_1 + \frac{4}{3} h f_2 + \frac{h}{3} f_3$$

- Egy nagyságrenddel jobb hiba mint amit várnánk $O(h^5)$ len

4 pontos hímpróbaál nem járul

Altaiánontá

$$\int_{x_1}^{x_n} f(x) dx = a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_n f_n$$

$$\int_{x_1}^{x_N} x^j dx = \frac{x_N^{j+1} - x_1^{j+1}}{j+1}$$

Allandó együtthatók lin. differenciál
 $(a_1, \dots, a_N)$ -re. Ez nem valami halálra.

Kitejtett trapéz formula

Most N db. intervallum van. $(a$ -tól b -ig)

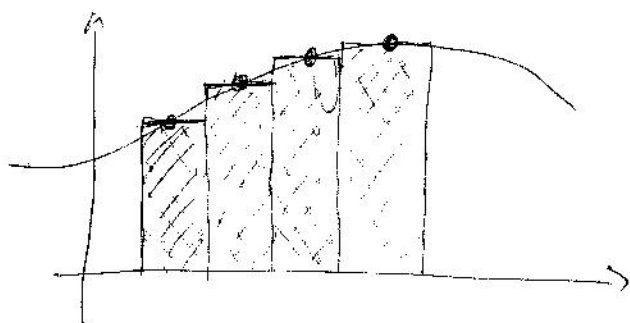
Hiba: $h^3 N$ $h = \frac{b-a}{N} \rightarrow$

$$h^3 N = \frac{(b-a)^3}{N^2} \rightarrow O\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

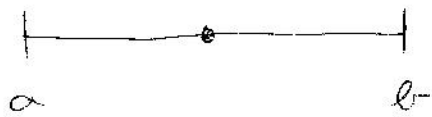
Kitejtett Simpson

$$h^5 \frac{N}{2} = \frac{(b-a)^5}{2 N^4} \rightarrow O\left(\frac{1}{N^4}\right)$$

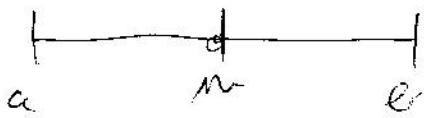
összpontos szabály



Egy jól választott



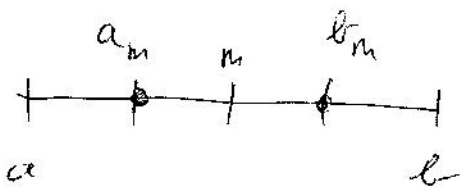
$$I_1 = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$$



$$I_2 = \frac{b-a}{2} \left[\frac{1}{2} f(a) + f(m) + \frac{1}{2} f(b) \right]$$

$$\text{de } I_2 = \frac{1}{2} I_1 + \frac{(b-a)}{2} f(m)$$

↑
val 1 pontban kell
újra kiértékelni



~~I_3~~

$$I_3 = \frac{b-a}{4} \left[\frac{1}{4} f(a) + f(a_m) + f(m) + f(l_n) + \frac{1}{4} f(b) \right] =$$

$$= \frac{1}{4} I_1 + \frac{1}{2} I_2 + f(a_m) + f(l_n)$$

→ Euler - MacLaurin ~~fejezet~~ formula
(Num. Rec - ver)

az egy asimptotikus sor.

→ Egy darabig jól közelíti az
eredményt majd eldivergál.

$$I_h = \int_a^b f(x) dx + \underbrace{a_1 h^2 + a_2 h^4 + a_3 h^6}_{h^2 \text{ polinoma}}$$

$$I_{\frac{h}{2}} = \int_a^b f(x) dx + a_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + a_3 \left(\frac{h}{2}\right)^6$$

$$I_{\frac{h}{4}} = \int_a^b f(x) dx + a_1 \left(\frac{h}{4}\right)^2 + a_2 \left(\frac{h}{4}\right)^4 + a_3 \left(\frac{h}{4}\right)^6$$

$$I_{\frac{h}{8}} = \dots$$

I_h egy általános konstanciákkal a
hibátagok kifejezhetőek

valami $N-1$ rendű polinomot illesztünk
az I_h sorokra (???) Lagrange interpo-
láció

Neville algorithmus (Dum sec)

$$\begin{array}{cccc} P_1 & & & \\ & P_{12} & & \\ P_2 & & P_{123} & \\ & P_{23} & & P_{1234} \\ P_3 & & P_{234} & \\ & P_{34} & & \\ P_4 & & & \end{array}$$

ezzel ismétlődően a Lagrange interpolációt

Két "homogénizációból" ~~is~~ adódik az ún. Romberg integrálás!

Nem egyenletes felosztást választunk

→ ugyanazt a verőponttal ~~is~~
meggyőzően jobb közelítést $C(h^2) \rightarrow C(h^4)$

Gauss quadratúra $\rightarrow W(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$

$$\int W(x) f(x) \approx \sum w_j f(x_j)$$

↑
súlyfüggvény

ortogonalis polinomvendreit hell
definiálin!

$$0 = \langle P_{j+1} | P_j \rangle = \langle x P_j | P_j \rangle - a_j \langle P_j | P_j \rangle - \underbrace{b_j \langle P_{j-1} | P_j \rangle}_{=0}$$

tehát

$$a_j = \frac{\langle x P_j | P_j \rangle}{\langle P_j | P_j \rangle}$$

$$0 = \langle P_{j+1} | P_{j-1} \rangle = \langle P_j | x P_{j-1} \rangle - a_j \langle P_j | P_{j-1} \rangle - b_j \langle P_{j-1} | P_{j-1} \rangle$$

$$\int_a^b x P_j(x) P_{j-1}(x) W(x) dx$$

$$P_j = (x - a_{j-1}) P_{j-1} - b_{j-1} P_{j-2}$$

$$x P_{j-1} = P_j + a_{j-1} P_{j-1} + b_{j-1} P_{j-2} \quad \text{tehát}$$

$$\langle P_j | x P_{j-1} \rangle = \langle P_j | P_j \rangle$$

$$b_j = \frac{\langle P_j | P_j \rangle}{\langle P_{j-1} | P_{j-1} \rangle}$$

$$\langle p_{j+1} | p_k \rangle = \langle p_j | x p_k \rangle - a_j \langle p_j | p_k \rangle -$$

$$b_j \langle p_{j-1} | p_k \rangle$$

"0" $\rightarrow$ indukció
feltétele

(eddig is ezt
feltételeztük, hogy
ezt tudjuk)

$\langle p_j | x p_k \rangle$ -t megadjuk valamilyen

$$p_{k+1} = (x - a_k) p_k - b_k p_{k-1}$$

$$\langle p_k = p_{k+1} + a_k p_k + b_k p_{k-1}$$

ebből látjuk, hogy $\langle p_j | x p_k \rangle = 0$

Orthogonális polinomok és az integrálás
 könnyű háprólát van!

$$W(x) \quad P_N(x) = 0$$

ortogonális $x_1, x_2, \dots, x_n$ len



$$P_N(x) = 0$$

van N db. azaz gyök

éveshelyzet

(orthogonális polinomok)

mindig az előző "nagy" polinomok
 gyökéi lennek beférnek!

→ így lokalizálni lehet a éveshelyzetet
 pl Newton-Raphsonnal

$$\int_a^b W(x) \underbrace{P_0(x)}_1 P_0(x) = \langle P_0 | P_0 \rangle = 0$$

$$\int_a^b W(x) \underbrace{P_0(x)}_1 P_1(x) = \langle P_0 | P_1 \rangle = 0$$

⋮

$$\int_a^b W(x) P_{N-1}(x) = \langle P_0 | P_{N-1} \rangle = 0$$

$$\int_a^b w(x) p(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} w_i P_i(x_i) \quad k=0, \dots, N-1$$

így kapunk egy lineáris egyenletrendszert

$$\begin{bmatrix} p_0(x_1) & \dots & p_0(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ p_{N-1}(x_1) & \dots & p_{N-1}(x_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int w(x) p_0(x) dx \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

(Gauss-Legendre módszer)

Modern numerikus

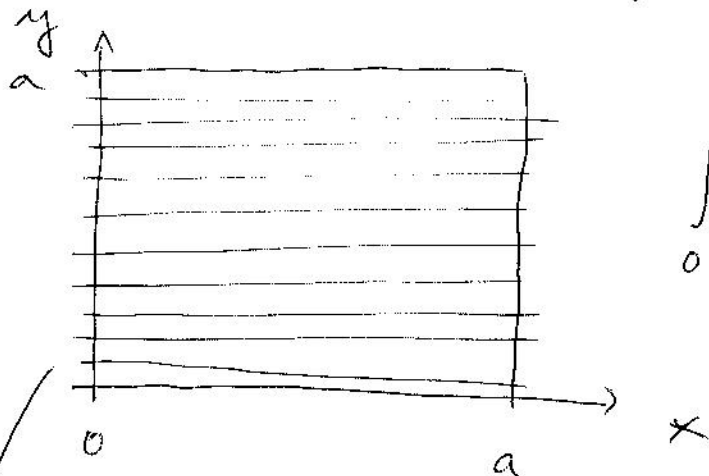
módszerek

4. előadás

(2012-03-22)

Eddig 1D-1 integrálók voltak

probléma: ^{Több} 2D-5 integrál



$$\int_0^a \left(\int_0^a f(x,y) dx \right) dy$$

x irányú integrálást kell először elvégezni sok dimenzióban nagyon gépigényes

$$\int_0^1 f(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j)$$

Monte-Carlo
módszer

véletlen
változó

egysétes eloszlás törvény szerint:

$$\left\langle \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \right\rangle = \int_0^1 \int_0^1 \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \right) P(\xi_1) P(\xi_2) \dots P(\xi_N) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_N$$

Tagok

$$\frac{1}{N} \iiint f(\xi_2) P(\xi_1) P(\xi_2) \dots P(\xi_N) \dots P(\xi_N) d^N \xi$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^1 f(\xi_2) P(\xi_2) d\xi_2 = \frac{1}{N} \overline{f(\xi)}$$

ha $P(\xi) \equiv 1$ $\rightarrow \overline{f(\xi)} = \int_0^1 f(x) dx$
(egyenletes eloszlás)

Mennyire pontos a közelítés?

$$\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) - \langle f \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \right)^2 \right\rangle +$$

$$\underbrace{\langle f \rangle^2 - 2 \langle f \rangle \langle f \rangle}_{-\langle f \rangle^2}$$

↑
visszatér a tagot!

$$\int_0^1 \int_0^1 f(\xi_1) f(\xi_2) P(\xi_1) P(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2 =$$

$$= \left(\int_0^1 f(\xi_j) P(\xi_j) d\xi_j \right)^2 = \langle f \rangle^2 \quad \leftarrow \text{ez a horent-} \\ \text{tagolbol}$$

$\langle f^2 \rangle$ -et pedig $\int f^2(\xi) \dots$ -s tagol
adják!

$$\frac{N}{N^2} \langle f^2 \rangle + \underbrace{\frac{N(N-1)}{2N^2}}_{\left(1 - \frac{1}{N}\right)} \cdot 2 \langle f \rangle^2 - \langle f \rangle^2 =$$

$$\left\langle \left(\frac{1}{N} \sum f(j) \right)^2 \right\rangle$$

$$= \frac{1}{N} \left(\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2 \right)$$

Tchat

$$\int_0^1 f(x) dx = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \pm \underbrace{\sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}}_{\text{libetas}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}}}_{\text{jó rom}}$$

peldánu: határintegrál a kvantummechanikában

$$\int Dq(t) e^{\frac{i}{\hbar} \int L(q(t), \dot{q}(t), t) dt} \quad (\text{erős közelítés})$$

térben akár 1 millió dimenziós integrál

Ha

$$\int_a^b f(\xi) \underbrace{P(\xi)}_1 d\xi$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{b-a} \langle f \rangle$$

↑
tautonóm
"lévegata"

$$\int_V f(x) d^N x = \int_V \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \right)$$

példa

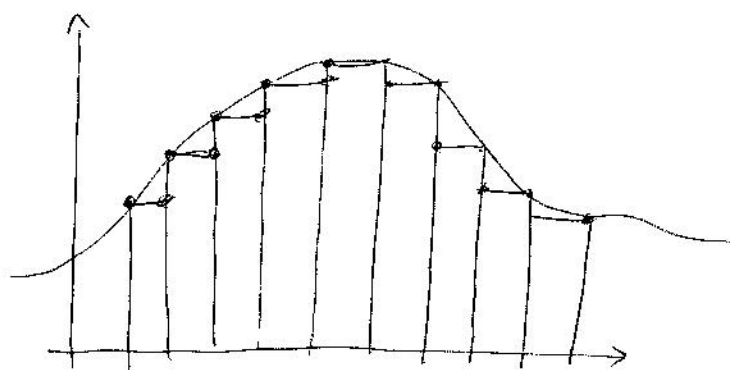
$$\int_0^1 e^{10x} dx$$

pontos szám kiírása
nén!

írdemes integráltranszformációt használni,
hogy konstansá tegyük (kiért) az
integrandust

• erőbenteni kell a szám

• nem biztos hogy az a jó, ha független
valószínűségi változókkal dolgozom



$$O\left(\frac{1}{N}\right)$$

(sima integrálás)

Típus : Halder féle eljárás

0 $\rightarrow$ H_0 $\rightarrow$ bináris
1 $\rightarrow$ H_1 törtel
2 $\rightarrow$ H_2 (de lehet
: prímszám
alapszám)

$n \rightarrow H_n$

5.

pl 10010

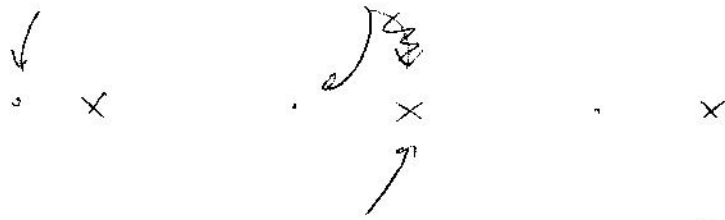
$\downarrow$ megfordítás

01001

$\downarrow$ első szám

0.01001 egy 0.

eredeti rámpa



Halder eljárás

örme nina jönnel

Egy leffelteltes eljárás kiválasztott rámpa
gyártásán

$j \rightarrow 101001101$

$V_1, V_2, V_3, \dots, V_N$

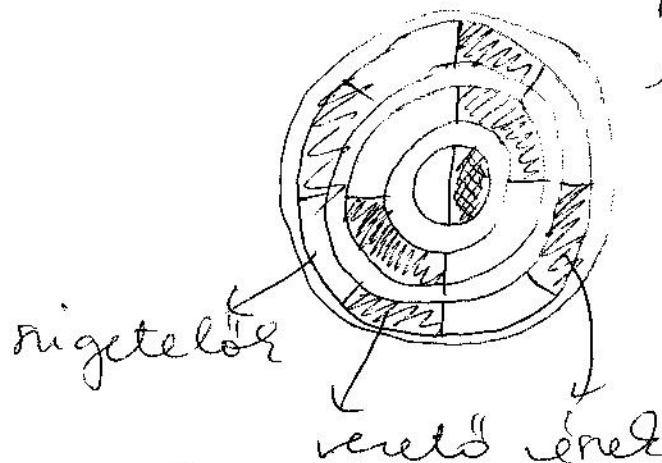
Sobol
forrasat

$V_j \otimes V_2 \otimes V_3 \otimes V_6 \otimes V_8$
XOR

Gray - kód

$j \rightarrow G_j$

eredeti forgótársa
pozícióját
hellelt
meghatáro



$$G_j = j \otimes \left[\frac{j}{2} \right]$$

↑ $\frac{j}{2}$ egész része

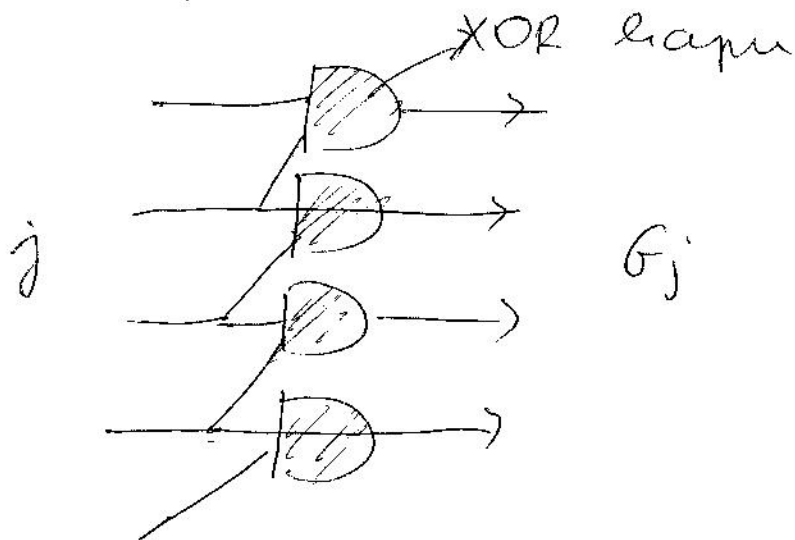
$$\begin{array}{r} j \dots a0 \\ \quad \quad \quad ba \\ \left[\frac{j}{2} \right] \hline a \end{array}$$

$$\begin{array}{r} j+1 \dots a1 \\ \quad \quad \quad ba \\ \left[\frac{j+1}{2} \right] \hline \bar{a} \end{array}$$

$$\begin{array}{r} j \quad ba01111 \\ \quad \quad ba0111 \\ \hline G_j \dots a1000 \dots \end{array}$$

$$\begin{array}{r} j+1 \quad ba10000 \\ \quad \quad ba1000 \\ \hline G_j \quad \quad \bar{a}1000 \end{array}$$

eggyel növelve az indexet csak
1 helyen változik a bit



(Numerical Recipes: 20-ik fejezet Less
numerical algorithm) 7

Gray hódossal $\frac{1}{\sqrt{N}}$ -es hibával

$\frac{1}{N}$ -est lehet minimalni

sőt akár $N^{-2/3}$

most a $\sqrt{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}$ rövidítve ~~változat~~
változatok!

$$\int f(x) d^n x = \int \underbrace{\frac{f(x)}{P(x)}}_{\text{ennek a mennyiségnek a változatok}} P(x) d^n x =$$

ennek a mennyiségnek
a változatok

$$= \left\langle \frac{f}{P} \right\rangle \pm \sqrt{\frac{\left\langle \frac{f^2}{P^2} \right\rangle - \left\langle \frac{f}{P} \right\rangle^2}{N}}$$
$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{f(\xi_j)}{P(\xi_j)}$$

↓
hogyan választani meg
p-t hogy ez minimális
legyen?

Variálunk! $p(x)$ nemint

$$\int p(x) dV = 1 \quad \text{mellékfeltétel}$$

$$\delta \left(\left\langle \frac{f^2}{p^2} \right\rangle - \left\langle \frac{f}{p} \right\rangle^2 - \lambda \int p(x) dV = 1 \right) = 0$$

Lagrange
multiplikátor

$$\delta \int dV \left[\frac{f^2(x)}{p(x)} - \lambda p(x) \right] = 0$$

$$\rightarrow \int dV \left[-\frac{f^2}{p^2(x)} \delta p - \lambda \delta p \right] = 0 \rightarrow -\frac{f^2}{p^2} - \lambda = 0$$

$$\rightarrow \boxed{p(x) = \frac{|f(x)|}{\sqrt{-\lambda}}}$$

tehát

$$p(x) = \frac{|f(x)|}{\int |f(x)| dV}$$

$$\int |f(x)| dV$$

dehát most ezt az integrált
g. karakter elvégzési, ezt nem ismerjük!

ez csak elméletben jó!

$$V = V_a + V_b$$

$$N_a \quad N_b - N_a = N_b$$

$$\langle f_a \rangle = \frac{1}{N_a} \sum_{j=1}^{N_a} f(\xi_j) \quad \xi_j \in V_a$$

$$\langle f_b \rangle = \frac{1}{N_b} \sum_{j=1}^{N_b} f(\xi_j) \quad \xi_j \in V_b$$

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) \quad \xi_j \in V$$

(Random numbers 7. fejezet)

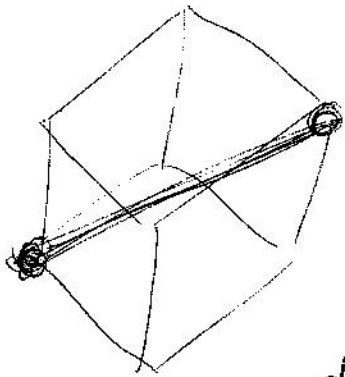
$$\int f dV \approx V \langle f \rangle$$

$$\int f dV \approx V \left(\frac{1}{2} \langle f \rangle_a + \frac{1}{2} \langle f \rangle_b \right)$$

~~$\int f dV$~~

$$p(x_1, x_2, \dots, x_N) = g_1(x_1) g_2(x_2) \dots g_N(x_N)$$

feltételezük
hogy normal
alakú



ha pl csak az átló
mentén vesz fel értéket
és a normál nem jó!

de átló mentén az átló mentén
koordinátatengelyre

normal alakban is végezünk el
a variációs módszert! (Adaptive Monte
Carlo = VEGAS)

Modern numerikus

módszerek

6. előadás

(2012 - 04 - 26)

(léstem egy kicsit)

Lánc törték (Num. Recipes, jól men
ez a honlapja)

9b-előadás, html

Lánc tört kiértékelés

Alkalmazások

→ Gamma függvény

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt$$

van rá közelítő formula lánc törték
segítségével 6 ta

→ Euler fele ^{beta} gamma függvény

→ Hibafüggvény $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$

Valamit liwyjt a táblával (eddig
retitőről ment):

$$\gamma\left(\frac{1}{2}, x^2\right) = \int_0^{x^2} \underbrace{e^{-t} t^{\frac{1}{2}-1}}_{\frac{1}{\sqrt{t}}} dt =$$

átváltó helyettesítés:

$$u = \sqrt{t} \quad du = \frac{1}{2\sqrt{t}} dt$$

$$= 2 \int_0^x du e^{-u^2}$$

Poisson eloszlás

$$\sum_{n=0}^{k-1} \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} = Q(k, \lambda)$$

egy esemény beveszélyezése
közvetlenül az mint k

$$\Gamma(k, \lambda) = \int_{\lambda}^{\infty} e^{-t} t^{k-1} dt = -e^{-t} t^{k-1} \Big|_{\lambda}^{\infty} +$$

$$+ \int_{\lambda}^{\infty} e^{-t} (k-1) t^{k-2} dt \dots$$

Tehát a lényeg, hogy Γ -ra ismerünk
 egy "una közelítő" formulát és Γ -ból
 egy valós másképp függvény előállítható
 (Euler-beta, hibafüggvény, Poisson, χ^2
 eloszlás, exponenciális integrálók)

Béta-függvény $\rightarrow$ Student-eloszlás
 $\rightarrow$ F-eloszlás
 $\rightarrow$ Binomiális-eloszlás

Num. Rec. $\rightarrow$ Bessel függvények

Ha ismert egy speciális függvény differenciálható akkor ezeket lehet megoldani.

Differenciálható megoldás

$$y' = f(y, x)$$

$$y(x + \Delta x) - y(x) = \int_x^{x + \Delta x} f(y, x) dx$$

$\approx f(y(x), \Delta x) \rightarrow$ Euler
explicit Euler

$$y(x + \Delta x) = y(x) + \Delta x f(y(x), x)$$

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_n, x_n)$$

Runge-Kutta - Stör módszer

- Másodrendű konvergencia egyenletünk
van akkor Störmer-szabály

16.6 Stiff sets of equation

$$u' = 998u + 1998v$$

$$v' = -999u - 1999v$$

~~matrix determinants~~

transformations

$$u = 2y - z$$

$$v = -y + z$$

$$u' = -2y + 1000z$$

$$v' = y - 1000z$$

$$y = u + v$$

$$z = 2v + u$$

$$y' = u' + v' = -y$$

$$z' = 2v' + u' = -1000z$$

$$\boxed{\begin{array}{l} y' = -y \\ z' = -1000z \end{array}}$$

integrálunk

a differenciál egyenletet

$$y = e^{-x}$$

$\Rightarrow$

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

$$z = e^{-1000x}$$

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

⑤

let's look at the solution

pl explicit Euler

$$z_{n+1} = z_n - 1000 \cdot h \cdot z_n = (1 - 1000h) z_n$$

csak akkor konvergens ha $h < \frac{2}{1000}$

oscilláló elnáll

megoldás: átvenni implicit módszere

$$z_{n+1} = z_n - 1000h z_{n+1}$$

$$z_{n+1} = \frac{z_n}{1 + 1000h}$$

$$\frac{dy}{dx} = \underline{\underline{C}} y \quad y_{n+1} = y_n + \underline{\underline{C}} y_n \cdot h$$

$$y_{n+1} = \left(\underline{\underline{1}} + \underline{\underline{C}} h \right) y_n$$

ha a matrix sajátértékei

-nél ~~negatívak~~ (?) akkor instabil
nagyokkálal

calis

⑥

implicit

$$\underline{y}_{n+1} = \left(\underline{I} - \underline{C} h \right)^{-1} \underline{y}_n$$

es garantiert
1-stel Linsch
s. e'-

Ha nun linearis at ergibt es

$$\frac{d\underline{y}}{dx} = \underline{f}(\underline{y})$$

$$\underline{y}_{n+1} - \underline{y}_n = h \cdot \underline{f}(\underline{y}_{n+1})$$

$$\underline{f}(\underline{y}_n) + \left. \frac{\partial f_i}{\partial y_j} \right|_{\underline{y}_n} (\underline{y}_{n+1} - \underline{y}_n)_j$$

$$\left(\delta_{ij} - \frac{\partial f_i}{\partial y_j} h \right) (\underline{y}_{n+1})_j = (\underline{y}_n)_i + h f_i(\underline{y}_n) - h \frac{\partial f_i}{\partial y_j} (\underline{y}_n)_j$$

Hibaleadás hírdése

$y_n^{(1)}$ első hibája

$$\underline{y}_n^{(1)} - (y(x+nh)) = O(h^\alpha) = a h^\alpha$$

$$\underline{y}_n^{(2)} - y\left(x+n\frac{h}{2}\right) = a\left(\frac{h}{2}\right)^\alpha$$

$$\underline{y}_n^{(1)} - \underline{y}_n^{(2)} = a\left(1 - \frac{1}{2^\alpha}\right)h^\alpha$$

erősen invariáns
részek egy adott
módszerben

abszolút hiba:

$$a\left(\frac{h}{2}\right)^\alpha = \left(\underline{y}_n^{(1)} - \underline{y}_n^{(2)}\right)(2^\alpha - 1)$$

Jobb Kung - Lutta (16.2) ∞ , 717.5

Modified Midpoint Method

Elliptikus integrálok

$$\int R(x, \sqrt{x^4 + x^3 + x^2 + x + 1}) dx$$

↘ nemaverelehető
§ elliptikus
integrálok
összege

Ha van elliptikus integrál:

1)

$$F(x, k) = \int_0^x \frac{1}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2 t^2)}} dt$$

2)

$$E(x, k) = \int_0^x \sqrt{\frac{1-t^2}{1-k^2 t^2}} dt$$

3)

$$\Pi(x, k, \nu) = \int_0^x \frac{dx}{(1-\nu t^2) \sqrt{(1-t^2)(1-k^2 t^2)}}$$

267. § duplication theorem

Modern numerikus módszerek

7. előadás

(2012 - 05 - 03)

diffegyenletekről len. nő
(11. hét kezdő előadás)

Egy pontjálalau rögzített súlyos szimul.
pérgeltyn

sol - sol kód. -

Boer - Hoerlitz módszer vs. Runge-Kutta
még több C++ kód...

meres egyenletek

szereplő feladatok



$$\frac{dy_i}{dx} = f_i(x, y_1, \dots, y_N) \quad i = 1, \dots, N$$

feltételek

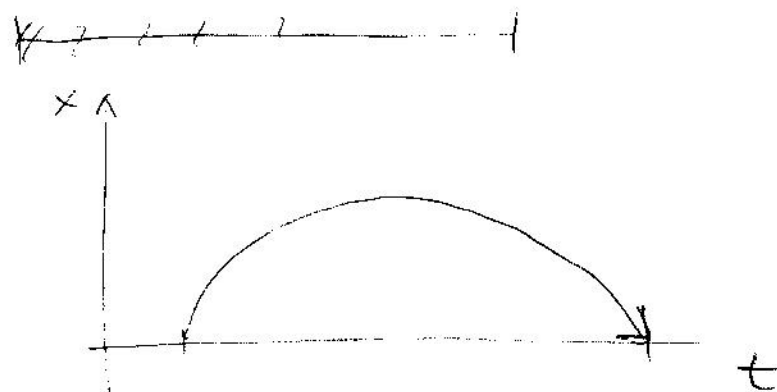
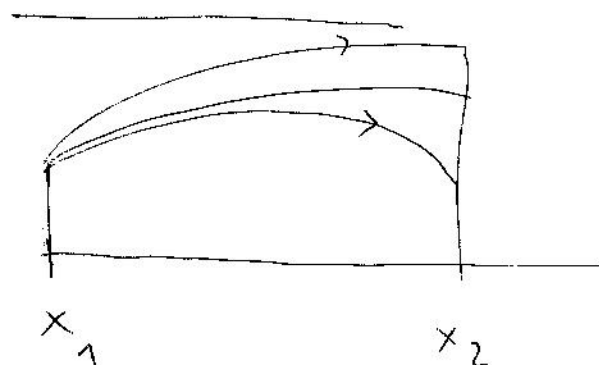
$$j = 1, \dots, n_1 \quad B_j(x_1, y_1^{(x)}, \dots, y_N^{(x)}) = 0$$

$$n_1 + n_2 = N$$

$$k = 1, \dots, n_2 \quad B_k(x_2, y_1(x_2), \dots, y_N(x_2)) = 0$$

modrak Num Rec 17. fejezet

1) "shooting"



adott időben
adott helyre $\rightarrow$ apódjon
be a lövedék

relatívumokhoz lövő és az eltérít
minimalizáljuk

$$B_{22}(x_2, y_1(v_1, v_2, \dots, v_n, x_1), \\ y_2(\dots), \\ \vdots \\ y_n(\dots)) = 0$$

ent az egyenletrendszert kell megoldani
(nem-lineáris görölberésis)
 $\rightarrow$ más lépésben

$$B_{22}(V^{(n)}) + \frac{\partial B_{22}}{\partial V_j} (V_j^{n+1} - V_j^{(n)}) + \dots = 0$$

$$V_j^{(n+1)} = V_j^{(n)} - \left(\frac{\partial B_{22}}{\partial V_j} \right)^{-1} B_{22}(V^{(n)}) \quad (\text{Newton-Raphson})$$

probléma: módszer konvergenciája

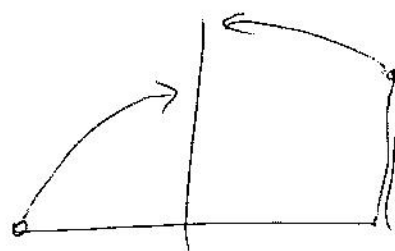
$$\left(\sum_{k=1}^{n_2} (B_{2k})^2 \right) = 2 B_{2k} \cdot \frac{\partial B_{2k}}{\partial V_j} \delta V_j =$$

$$|\delta V| \ll 1$$

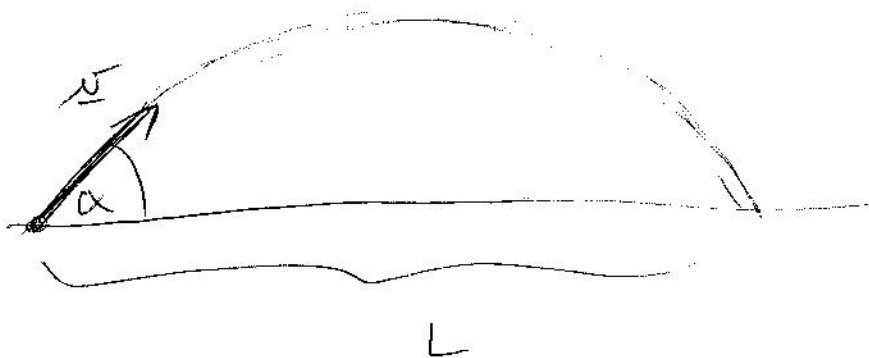
$$= -2 B_{2k} \left(\frac{\partial B_{2k}}{\partial V_j} \right) \left(\frac{\partial B_{2k}}{\partial V_j} \right)^{-1} \cdot B_{2k}$$

Tehát. Newton-módszer + vizsgálni hogy
a kísérlet megvalósítható-e

shooting 'B'-vel



↑ kiinduló pontban
megpróbáljuk össze-
passzítani



$$v \cdot \cos \alpha \cdot t = L$$

$$v \cdot \sin \alpha \cdot t = \frac{1}{2} g t^2$$

α -szöget
változtathatjuk
L távolságra
aholra hogy
leszálljon

$$L \rightarrow \left[\sin(2\alpha) = \frac{gL}{v^2} \right] \leftarrow$$

adott L -hez ilyen α n6gy lehet

~~(Korlatok)~~

$$\ddot{x} = 0 \quad \ddot{y} = -g$$

$$x(0) = y(0) = 0$$

$$x(t_2) = L$$

$$y(t_2) = 0$$

$$(\dot{x}(0))^2 + (\dot{y}(0))^2 = v^2$$

deciunz n6m6k változ6sai:

$$t = \gamma \cdot s \quad \frac{dt}{ds} = \gamma \quad \frac{d\gamma}{ds} = 0$$

$$s=0 \quad t=0 \quad s_1=1 \quad t=t_2$$

$$x(1) = L \quad y(1) = 0$$

$$\frac{dx}{ds} = \frac{dx}{dt} \cdot \frac{dt}{ds} = \gamma \cdot v_x$$

$$\frac{dy}{ds} = \gamma \cdot v_y$$

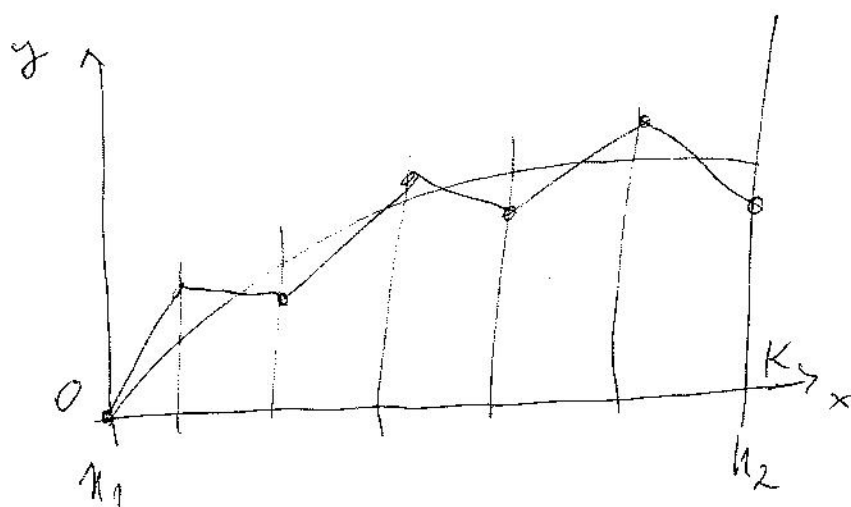
$$\frac{dv_x}{ds} = 0$$

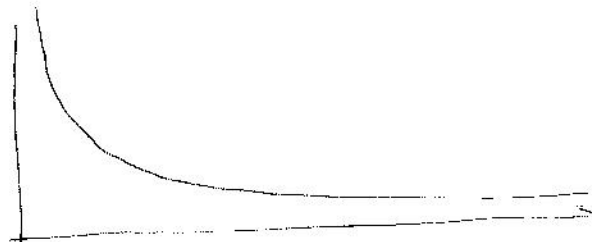
$$\frac{dv_y}{ds} = \frac{dv_y}{dt} \cdot \gamma = -g \cdot \gamma$$

$$\frac{dt}{ds} = \gamma \quad \frac{d\gamma}{dt} = 0$$

3 db differenciálegyenlet és 6 db feltétel

2. Relaxációs módok

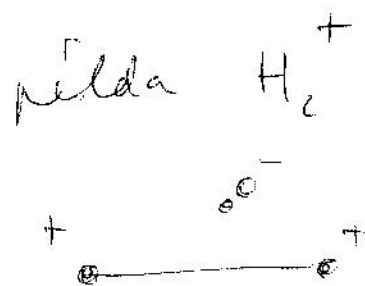


pl.:  ilyen megoldás esetén az jobb mint a shooting

shooting: gyors és egyszerű

relaxáció lassabb de megfizethetőbb

17.4 fejezet (példa)
(gömbi) harmonikus
sferoidális



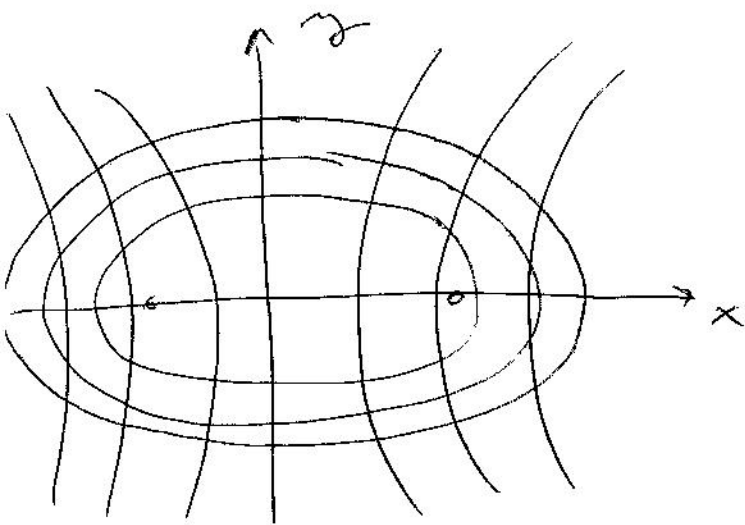
elliptikus
Jacobi-átalakítás
reparametrizáció

Modern numerikus
módszerek

(2012 - 05 - 17)

8. előadás

$$\frac{d}{dx} \left[(1-x^2) \frac{dS}{dx} \right] + \left(\lambda - c^2 x^2 - \frac{m^2}{1-x^2} \right) S = 0$$



$$x = a \operatorname{ch} \mu \cos \nu$$

$$y = a \operatorname{sh} \mu \sin \nu$$

ha $\mu = \text{állandó}$ $\rightarrow \frac{x^2}{a^2 \operatorname{ch}^2 \mu} + \frac{y^2}{a^2 \operatorname{sh}^2 \mu} = 1$

$\nu = \text{állandó} \rightarrow \frac{x^2}{a^2 \cosh^2 \nu} + \frac{y^2}{a^2 \sinh^2 \nu} = 1$

3D-ben forgásmög

x tengely körül

össenyesztés

y tengely körül

újított

Legyen

$$\sigma = \cosh \mu ; \quad \tau = \sin \nu$$

ehhő a Laplace nyújtott esetben:

$$\Delta \phi = \frac{1}{a^2 [\sigma^2 - \tau^2]} \left[\frac{\partial}{\partial \sigma} \left[(\sigma^2 - 1) \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right] + \frac{\partial}{\partial \tau} \left[(1 - \tau^2) \frac{\partial \phi}{\partial \tau} \right] \right] + \frac{1}{a^2 (\sigma^2 - 1)(1 - \tau^2)} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2}$$

Legyen

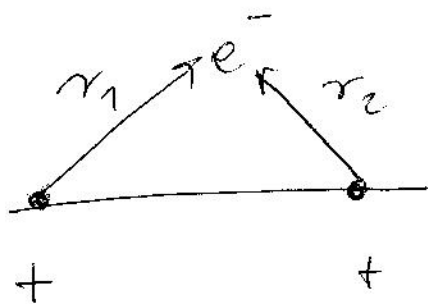
$$\phi = A(\sigma) B(\tau) C(\varphi)$$

ehhő

$$\frac{\phi}{a^2 (\sigma^2 - \tau^2)} \left\{ \frac{1}{A} \frac{d}{d\sigma} \left[(\sigma^2 - 1) \frac{dA}{d\sigma} \right] + \frac{1}{B} \frac{d}{d\tau} \left[(1 - \tau^2) \frac{dB}{d\tau} \right] + \left[\frac{1}{1 - \tau^2} + \frac{1}{\sigma^2 - 1} \right] \frac{d^2 C}{d\varphi^2} \right\} = 0$$

$$\text{megoldás} \rightarrow C = e^{im\varphi}$$

Hidrogén molekula
ion



$$r_1 + r_2 = 2a$$

$$r_1 = a(\sigma + \tau)$$

$$r_1 - r_2 = 2a\tau$$

$$r_2 = a(\sigma - \tau)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

Megoldando:

$$\Delta\psi - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \psi = \epsilon \psi$$

meg kell oldani a peremérték feladatát. pl a multimer módszerrel (relaxáció, shooting) 17.4 lejtet

~~$$\psi = 2a_1 x + (1-x^2) [2a_2 x + \dots]$$~~

→
énlétesen
itt van a pelda!

Parciális differenciál egyenletek
megoldása (Általános numerikus
modellre diákon)

Súlyozott maradékos módszer (MWR)

megoldás: $u(x) = \sum_k a_k \phi^k(x)$, $\xi_j(x)$
Súlyfüggvényre vonatkozóan:
- Galjosiánus-módos $\uparrow$ próba- $\uparrow$ súly-
függvény

- Tau-módos

- Kollorációs-módos

- Legkisebb négyzetek módos

- Véges térfogat módos

Próbafüggvényre vonatkozóan:

- Véges elem módos

- spektrális és pseudospektrális módos

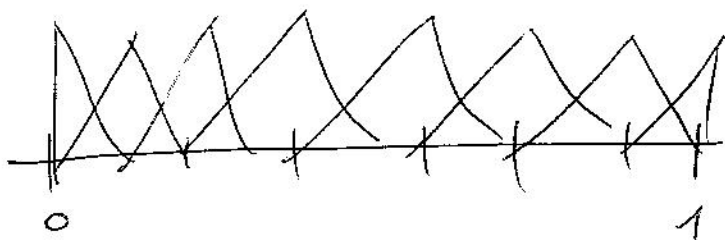
Veges elm módszer

$$\int_0^1 \psi \frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{du}{dx} \right) dx = \psi K \frac{du}{dx} \Big|_0^1 -$$

$$- \int_0^1 \frac{d\psi}{dx} K \cdot \frac{du}{dx} dx$$

(Saját előadási diáján van elmagyarázva)

Galjorkin



Spektrál-módszer

$$\phi(r) = \int e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} f(\underline{k}) d^3 \underline{k}$$

$$\nabla \phi(r) = \int i \underline{k} \cdot f(\underline{k}) e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} d^3 \underline{k}$$

Fontosabb redukálódás a deriválás

iteratív eljárások

→ konjugált gradiens módszer
(erősebb volt ná 1. dűn)

~~HA~~

prekondicionáló mátrix

RA sajátértékei közel lennének
1-hez ha jól választom meg P-t
→ javítja a kondicionáltságot

Gauss-Seidel módszer

Successive Overrelaxation

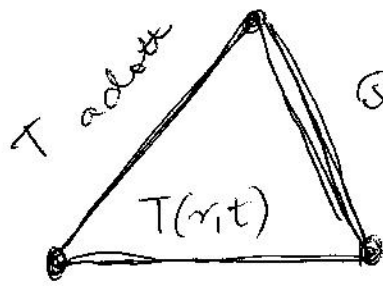
→ hisztériájú ingadozások kiküszöbölésére

Multigrid módszer

el lehet vele érni az $N \log N$ -es
bűgprést!

Feladat résleteiben: hővezetés 2D-ben

Hővezetési egyenlet



$$Q \sim T_{\text{sz}} - T_{\text{sz}}$$

$$\underline{n} \cdot \nabla T = K (T_{\text{sz}} - T)$$

$$Q = \nabla T \cdot \underline{n} = \text{adott}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \Delta T$$

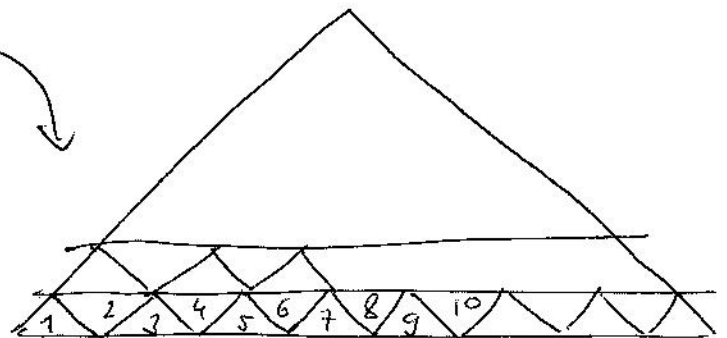
$$\underline{\dot{x}} = -\frac{D}{C} \nabla T$$

Korláti feltétel

hővezetési
lineáris egyenlet

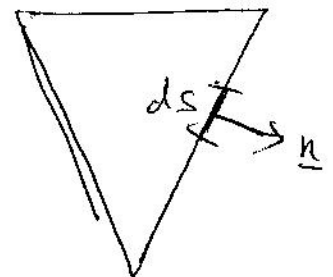
Vége térfogat módosítás
hővezetési egyenlet

Erdő a terület
hő az egyenletet
felírni:

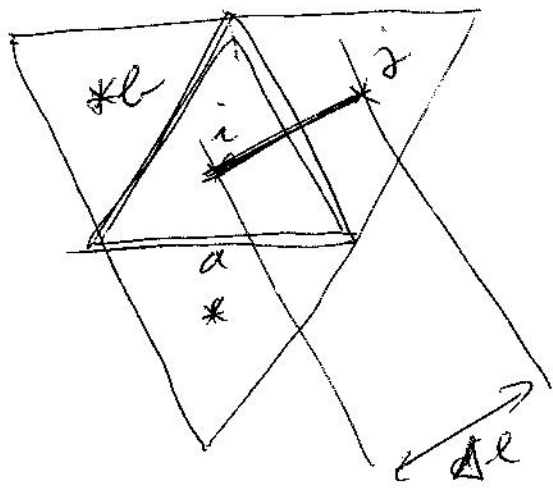


$$\frac{\partial}{\partial t} \int T dA = D \int \Delta T dA = D \oint \frac{\partial T}{\partial n} ds$$

$$\int \nabla T \cdot \underline{n} ds$$



$$i\text{-edile cella} \approx T_i \cdot A$$



$$\Delta l = \frac{2}{3} \frac{\sqrt{3}}{2} a = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$\frac{T_j - T_i}{\Delta l} a = \sqrt{3} (T_j - T_i)$$

$$A = \frac{1}{2} a \cdot a \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} =$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{4} a^2$$

$$\dot{T}_n = \frac{D}{A} (T_j + T_l + T_a - 3T_i)$$

Modern num módszerek

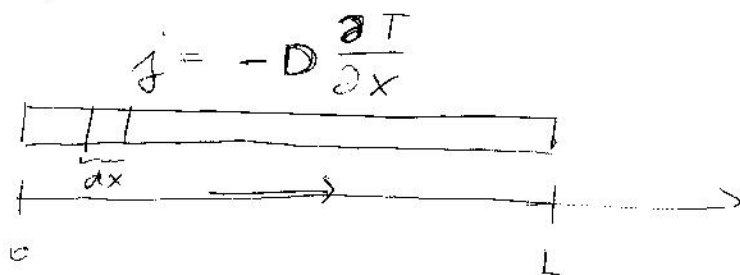
1. előadás

(2012 - 02 - 16)

<http://arpad.elte.hu/~bene>

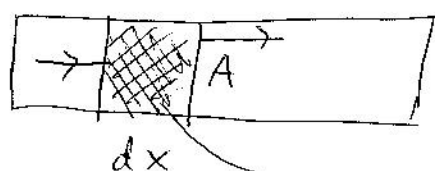
1 beadandó lesz, részben szóbeli a programról, módszerekről. C, C++ programozás

Fővertes rúdmeis mentén.



j hőáram

dx vastagságú rétegben
hőgyan változik



$$C \cdot A \cdot dx \cdot \frac{\partial T}{\partial x} = -D \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+dx}$$

beérő energia
megmunkával változik

$$+ D \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x =$$

$$= -C A A - D \left(\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x+dx} - \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_x \right)$$

$$\approx \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx \quad (\text{sorfejtés után})$$

1