TÉMAVÁZLAT 8-11. ALKALOM

Kémiai Számítástechnika Gyakorlat, Kémia BSc I. évf. 2019/2020 I. félév

(összeállította: Tóth Gergely)

TÉMAVÁZLAT

MATLAB, egyetemi licensz alapján internetről telepíthető vagy online formában is elérhető, akár otthonról is. A telepítéshez, illetve az online bejelentkezéshez MATLAb azonosító szükséges. Az azonosító megszerzésének a lépései:

I. CAESAR azonosító létrehozása (ha nincs még)
https://ugykezelo.elte.hu/
Belépés
Neptun ikonra kattintunk
Belépés Neptun azonosítóval és jelszóval.
IIG azonosító létrehozása

II. MATHWORKS
regisztráció a caesar azonosítóval a Mathworks portálon:
https://www.mathworks.com/academia/tah-portal/eotvos-lorand-tudomanyegyetem-31424701.html

sign in to get started:
igényelt iig azonosító@caesar.elte.hu
jelszó
matlab letöltése (r2019b)

III. MATLAB telepítés
unzip
windows: setup.exe futtatása rendszergazdai jogosultsággal
linux: sudo ./install

login in with mathworks account
login/password
select license/individual
Matlab 9.7 és Symbolic Math Toolbox 8.4 kiválasztása.

0. lépés: On Ramp online bevezető önálló elvégzése házi feladatként, KÖTELEZŐ (lásd a követelményeket)!

Az On Ramp-ben szereplő alapismeret az órán csak kiegészítésre kerül, illetve csak néhány hangsúlyosabb rész lesz megismételve.

Kezdő lépések

```
> disp(" muveleti sorrendek")
> x=2
> y=exp(x)*log(x)-log10(x)+sqrt(x)-ceil(x)+floor(x)-mod(x,2)+tan(x)
> sign(3.2)
> sign(-3.2)
> lookfor factor
> help factorial
> doc factorial
> factorial(20)
> help primes
> primes(100)
```

> Sor- és oszlopvektorok

```
> v=[2;34;2]
> v=[2,34,2]
> u=rand(1,3)
> size(u)
> v=cat(2,v,[4])
> u=cat(2,u,[4])
> v*u'
> dot(v,u)
> sum(v)
> prod(v)
> sum(v.*u) # . = elemenkent szoroz
> sort(v) # sorbarendezés
```

Komplex számok

```
> z=0.1+2i
> real(z)
```

```
> imag(z)
> abs(z)
```

Koordináta transzformációk

```
> lookfor polar
> [theta,r]=cart2pol(1,0)
> help cart2sph
```

Mátrixműveletek

```
> A=[1,2;3,4]
> B=randn(2,2)
> A*B
> C=randn(2,3)
> C*A  #?
> A*C
> C'*A
> det(A)
> inv(A)
> A*inv(A)
> eig(A)
> [vA,eA]=eig(A)
> A==B
> B=eye(2) #Diagonal Matrix
> trace(A)
```

Adatok tárolása – mátrix

n sor egy-egy mintát (objektumot) jelent

m oszlop: egy-egy tulajdonságot jelent

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{bmatrix}$$ *n* sor, *m* oszlop

Adat centrálása: értékekből oszlopátlagok kivonása

$$c_{ij} = d_{ij} - \frac{\sum_{i=1}^{n} d_{ij}}{n} = d_{ij} - \overline{d}_j$$

Adatok skálázása: értékek osztása az adott oszlop szórásával

$$c_{ij} = \frac{d_{ij}}{s_j} = \frac{d_{ij}}{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}\left(d_{ij} - \bar{d}_j\right)^2}{n-1}}}$$

Standardizálás (néha studentizálás, z-score, normál eloszlásnál szinte minden adat -3;+3 közé kerül)

$$c_{ij} = \frac{d_{ij} - \bar{d}_j}{s_j}$$

```
> D=rand(10,5)
> D(:,2)=cos(D(:,1))
> D(:,3)=D(:,1)*2+rand(10,1)
> D(:,4)=exp(D(:,1))
> D(:,5)=D(:,2)+D(:,4)+rand(10,1)*0.1
> mean(D)
> median(D)
> std(D)
> var(D)
> sortrows(D,2)
> A=zscore(D)
> mean(A) #standardizált átlaga 0
> std(A)  #standardizált szórása 1
```

Kovariancia – változók együttes mozgására és annak nagyságára utal

$$s_{xy}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - E_x)(y_i - E_y)}{n-1}$$

Korrelációs együttható, értéke [-1,1] intervallumba esik, lineáris kapcsolatra

utal: $r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - E_x)(y_i - E_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i - E_x)^2 \sum_{i=1}^{n}(y_i - E_y)^2}} = \frac{s_{xy}^2}{s_x s_y}$

```
> cov(D) #mátrixba rendezve…
> corr(D)
> cov(A) #standardizált kovarianciája=korrelációja az eredetinek
```

<u>Hipotézis vizsgálatok, varianciaanalízis</u>

F-próba (a null hipotézis megtartható, ha h=0, vagyis 0.05<p)

```
> [h,p]=vartest2(D(:,1),D(:,2))
```

Egymintás t-próba

```
> [h,p]=ttest(D(:,1),0.5)
> [h,p]=ttest(D(:,1),0.5,'tail','right')
```

Kétmintás t-próba

```
> [h,p]=ttest2(D(:,1),D(:,2))
```

Khi-négyzet teszt arra, hogy normáliseloszlású-e az adatsor

```
> x=randn(1,100)
> [h,p]=chi2gof(x)
> x=rand(1,100)
> [h,p]=chi2gof(x)
```

Varianciaanalízis

```
> anova1(D)
```

Nemlineáris egyenlet megoldása, maximum és minimum keresése

```
> fzero(@sin,[2,4])
> fzero(@sin,1)
> fminbnd(@sin,2,5)
Függvény írása: New scriptben, mentés:
> function y = LJ(x)
       y = 4*(3^12/x^12-3^6/x^6);
> LJ(4)
Vagy másik lehetőség:
> LJM = @(x) 4*(3^12/x^12-3^6/x^6)
> LJM(4)
> fzero(@LJ,2.3)
```

Inhomogén lineáris egyenletrendszer egyértelmű megoldása

```
> A=[2,4,6;2,3,1;-1,0,5]
> b=[8;7;-2]
> inv(A)*b
Cramer-szabállyal:
> B=A
> B(:,1)=b
> det(B)/det(A)
> B=A
```

```
> B(:,2)=b
> det(B)/det(A)
```

<u>Túlhatározott lineáris egyenletrendszer megoldása</u>

```
> a=[3,4,5]
> A=cat(1,A,a)
> b=cat(1,b,[4])
> inv(A'*A)*A'*b
```

<u>> Konstans tag szerepeltetése az e.h. mátrixban</u>

```
> A=cat(2,A,ones(4,1))
> inv(A)*b
```

<u>Valószínűségi változó függvényének eloszlása</u>

y=y(x) és x=x(y) kölcsönösen egyértelmű függvények x és y valószínűségi változók között. Mi y eloszlása, ha x eloszlását ismerjük?

$f_y(Y)|dy| = f_x(x(Y))|dx|$, amiből átrendezéssel: $f_y(Y) = f_x(x(Y))\left|\frac{dx}{dy}\right|$

Tehát ismert kapcsolat esetén f_y sűrűségfüggvény megkapható minden olyan Y értékre, ahol a dx/dy derivált létezik és y folytonos.

Feladat: Határozza meg $f_y(y)$-t, ha $y=\sqrt{x}$ és x λ=1 paraméterű exponenciális eloszlással írható le (x≥0). MATLAB-ball: Tabulálja 0.1-es x illetve y felosztással a sűrűségfüggvényeket és ábrázolja azokat.

```
> clearvars v
> for (i=1:60) v(i)=0.1*i; end;
> for (i=1:60) fx(i)=exp(-v(i)); end;
> for (i=1:60) fy(i)=2*v(i)*exp(-v(i)*v(i)); end;
> plot(v,fx)
> hold on
> plot(v,fy)
> hold off
> intx=sum(fx)*0.1 #görbe alatti terület ellenőrzése
> inty=sum(fy)*0.1 #görbe alatti terület ellenőrzése
```

Gyakorló feladat: Határozza meg $f_y(y)$-t, ha $y=x^2$ és x standard normális eloszlású. MATLAB-bal: Tabulálja 0.2-es x illetve y felosztással a sűrűségfüggvényeket és ábrázolja azokat. Teljesül-e, hogy a görbe alatti terület 1? Ha nem, miért és hogyan tudja rendbe tenni? Mi x és y értelmezési tartománya?

Gauss-féle hibaterjedési szabály

Legyen $y=f(x_1,x_2,\ldots,x_n)=f(\underline{x})$ egy többváltozós függvény. Az $x_1\ldots x_n$ változókat azonban nem pontosan ismerjük, csak becsüljük $\xi_1\ldots\ \xi_1$ valószínűségi változókkal. Ezen változók mindegyikéhez számolható becsült várható érték $E_1\ldots E_n$, becsült szórás ($s_1\ldots s_n$), annak négyzete a variancia (s_i^2), és számolható a kovarianciájuk (s_{ij}^2). Mekkora y varianciája?

Különböző közelítéseket alkalmazva (Taylor-sorfejtes, lineáris tag felettiek elhanyagolása...) levezethető, hogy

$$s_y^2 = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)^2 s_i^2 + 2\sum_{i<j}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial x_j}\right)s_{ij}^2 = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial y}{\partial x_i}\right)\left(\frac{\partial y}{\partial x_j}\right)s_{ij}^2$$

, ahol a parciális deriváltak számolásakor $x_1\ldots x_n$ változók $E_1\ldots E_n$ értékkel szerepelnek.

Feladat: vezessük le $y = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_1$ *függvény esetére* s_y^2 *képletét! Lineáris kombináció esetén*

$E_y = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i E_i$ *módon számolható.*

Feladat: Hogyan egyszerűsödik a képlet, ha $\xi_1\ldots\ \xi_1$ páronként független valószínűségi változók?

Feladat: Generáljon egy 10x3-as X mátrixot, ahol az oszlopok közül legalább az egyik valamilyen hibával terhelt kapcsolatban áll a többivel (n=3 oszlop (=változó), m= 10 sor (=mérés)). Becsülje meg a fenti képlet segítségével y varianciáját. Számolja ki az y_i értékeket is az X mátrix egy-egy sora alapján is, és az ebből számolható y varianciát hasonlítsa össze a becsülttel! A következő függvényeket használja:

a) $y=x_1+2*x_2-3*x_3$

```
> D=randn(10,3)
> D(:,3)=D(:,1)+2*D(:,2)+0.1*randn(10,1)
> CD=cov(D)
> y=D(:,1)+2*D(:,2)-3*D(:,3)
> PD=[1,2,-3;2,4,-6;-3,-6,9]
```

```
> var(y)
> sum(sum(CD.*PD))
```

b) $y=x_1*x_1+cos(x_2)*x_3$

c) $y=x_1*x_1+cos(x_2)+x_3$ *(otthoni gyakorlásra)*

A lineáris esetre ellenőrizze, hogy a várható érték pontosan számolható-e a két feladattal korábban szereplő képlettel!

Haladó feladat otthoni gyakorlásra, nem szerepel majd a ZH-ban: Az előző feladat valamelyik esetére adjunk meg konfidencia intervallumot E_y*-ra. Ennek megadásához azonban ismerni kell, hogy mekkora szabadsági fokú t-eloszlással dolgozzunk. Ennek értéke a következő képlettel becsülhető:*

$$\nu_y = \frac{s_y^4}{\sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial y}{\partial x_i} \right)^4 s_i^4 \frac{1}{m-1}}$$

, ahol m a mérések (X sorainak) száma.

Vessük össze ezt a konfidencia intervallumot azzal, mintha közvetlenül y_i *értékekből dolgoznánk.*

<u>Integrálás, Polinomok, Interpoláció</u>

> Integrálás

```
> clearvars v u
> for i=1:20 v(i)=i*0.1; u(i)=sin(v(i))+0.1*randn(); end;
> trapz(v,u)
> integral(@sin,0.1,2.0)
> integral(@sin,0,pi/2)
```

> Polinomok

```
> c=[2,3,4,5,1];         #koefficiensek (utolsó a konstans tag)
> a=[1,2,3,4];
> conv(a,c)              #szorzat
> polyder(a)             #deriválása
> q=polyder(a,c)         #szorzat deriváltja
> [q,r]=polyder(a,c)     #racionális törtfüggvény
> roots(a)               #gyökök
> for i=1:20 u(i)=v(i)+cos(v(i)*0.3); end;
> p=polyfit(v,u,5)       #polinom illesztése
> pint=polyint(p)        #polinom integrálása,határozatlan integrálás
```

```
> polyval(pint,pi()/2)-polyval(pint,0)    #helyettesítési érték
kiszámolása, Newton-Leibniz formula alapján
```

> Interpoláció

```
> interp1(v,u,1.05)
> interp1(v,u,1.05,'linear')
> interp1(v,u,1.05,'cubic')
```

Feladat

Polinom illesztése mért adatokra, integrálás (otthoni gyakorlásra)

Egy mérés során az idő függvényében rögzítik az adatokat, majd ennek idő szerinti integrálját próbálják meghatározni. Technikai okból a folyamat középső szakasza nem mérhető, de a mért mennyiség jól közelíthető 3-ad fokú polinommal.

Illesszen harmadfokú polinomot a fenti adatokra, majd számolja ki a polinom integrálját a *t*€[0;10] intervallumon. Hasonlítsa össze a kapott értéket a mért görbe közvetlenül trapézformulával meghatározott integráljával. Ez utóbbinál lineárisan extrapoláljon a *t*=0 esetre.

Mért adatok:

t	*y(t)*
0,5	-4,5
1	-6,8
1,5	-8,9
2	-12,5
2,5	-15,9
7,5	17,0
8	35,6
8,5	57,6
9	84,9
9,5	117,7
10	155,9

Fourier-transzformáció

Jean-Baptiste Joseph Fourier (1768—1830) francia matematikus és fizikus
Ugyanaz az információ, de más változó terében…

Fourier-transzformáció matematikai háttere:

Fourier-sorfejtés (Bevezető matematika 2-ből ismert, ott T=2π)

$$f(t) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\frac{2\pi nt}{T} + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin\frac{2\pi nt}{T}$$

$$\frac{a_n}{2} = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} f(t)\cos\left(\frac{2\pi nt}{T}\right)dt \qquad \frac{b_n}{2} = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} f(t)\sin\left(\frac{2\pi nt}{T}\right)dt$$

$$a_0 = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_0+T} f(t)dt$$

Periodikus függvény Fourier-sorfejtése exponenciális formában:

$$e^{it} = \cos(t) + i\sin(t) \qquad f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i\omega t}$$

$$\omega = \frac{2\pi n}{T} \qquad \nu = \frac{n}{T} \qquad c_n = \bar{c}_{-n} = \frac{a_n - ib_n}{2},\ n\neq 0$$

Fourier-transzformáció – folytonos, nem periodikus függvényre

Fourier-transzformáció: inverz Fourier-transzformáció:

$$F(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i2\pi\nu t}dt \qquad f(t) = \int_{-\infty}^{\infty} F(\nu)e^{i2\pi\nu t}d\nu$$

(több kicsit eltérő képlet van, a lényeg, hogy megfelelő oda-vissza párt használjunk)

Diszkrét Fourier-transzformáció

N mintavétel *Δt* gyakorisággal

jelölések: $\Delta\nu = \frac{1}{N\Delta t}$ $\qquad 2\pi\nu t = \frac{2\pi nk}{N}$

$$F(\nu) = F(k\Delta\nu) = F_k \qquad f(t) = f(n\Delta t) = f_n$$

Fourier-transzformáció: inverz Fourier-transzformáció:

$$F_k \equiv \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{-\frac{i2\pi nk}{N}} \qquad f_n \equiv \sum_{k=0}^{N-1} F_k e^{\frac{i2\pi nk}{N}}$$

Gyors Fourier-transzformáció: speciális számítási módszer, ha $N=2^k$ adatunk van. Ha kevesebb, érdemes ennyire kiegészíteni 0-kal, ez nem befolyásolja az eredményt.

Feladatok

1 sin transzformációja :

```
> n=256
> dt=1/n
> for i=1:n t(i)=(i-1)*dt; end;
> f=sin(t*15*2*pi);
> plot(t,f)
> dnu=1/n/dt
> for i=1:n nu(i)=(i-1)*dnu; end;
> F=fft(f);
> Fa=abs(F);
> Fr=real(F);
> plot(nu,Fa)
> plot(nu,Fr)
> Fa(15)
> Fa(16)
> Fa(17)
> finv=ifft(F);
> plot(t,finv)
```

3 sin keveréke, egyik frekvencia kivágása (frekvenciaszűrés):

```
> f=sin(t*15*2*pi)+sin(t*5*2*pi)+sin(t*30*2*pi);
> plot(t,f)
> F=fft(f);
> Fa=abs(F);
> plot(nu,Fa)
> Fa(16)
> Fa(242)
> F(16)=0+0i;
> F(242)=0+0i;
> finv=ifft(F);
> plot(t,finv)
> plot(t,f)
```

3 sin keveréke + zaj, zaj szűrése (amplitúdószűrés):

```
> f=sin(t*15*2*pi)+sin(t*5*2*pi)+sin(t*30*2*pi);
> fz=f;
> fz=f+2*randn(1,256);
> plot(t,fz)
> F=fft(fz);
> Fa=abs(F);
> plot(nu,Fa)
> for i=1:n if(Fa(i)<80) F(i)=0+0i; end; end;
> finv=ifft(F);
> plot(t,finv)
> plot(t,f)
```

Gauss fv. transzformálása (otthoni gyakorlásra)

```
> dx=0.1;
> for i=1:n x(i)=(i-1)*dx; end;
> s=1
> for i=1:n g(i)=1/sqrt(2*pi()*s*s)*exp(-x(i)*x(i)/2/s/s); end;
> plot(x,g)
> dnu=1/dx/n;
> for i=1:n nu(i)=(i-1)*dnu; end;
> G=fft(g);
> Ga=abs(G);
> plot(nu,Ga);
#utána ismételni s=0.5-tel es s=3-mal is!
```

MATLAB szimbolikus matematikai használata

Szimbolikus érték adható egy változóhoz

```
z = 2/3
x = sym(2/3)
x^2
x+3
double(x)
```

Szimbolikus változók definiálása, kifejezés megadása, cseréjük

```
syms y x a b c
y = a*x^2+b*x+c
y1=subs(y,[a b c], [3 4 5])
double(subs(y,[a b c x], [3 4 5 2]))
```

Szimbolikus egyenlet definiálása és szimbolikus megoldása

```
yeqn = y == 0;
solve(yeqn,x)
```

Szimbolikus kifejezés átalakításai

```
y = x*(x+2)^2 - 4*x
expand(y)
simplify(y)
factor(y)
```

Szimbolikus függvények megadása

```
syms x y
f(x) = exp(-x);
g(y) = y^2;
fog = f(g)
f(2)
double(f(2))
```

Szimbolikus deriválás

```
syms y x a b c
y = a*x^2+b*x+c
diff(y,x)
diff(y,x,2)
```

Parciális deriválás

```
syms x1 x2 x3
f = x1^2 + cos(x2)*x3;
diff(f,x1)
diff(f,x2)
diff(f,x3)
```

Parciális deriválás feltételekkel

```
syms U V n a0
S(U,V,n)=(a0*n*V*U)^(1/3);
assume(U>=0)
assumeAlso(V>=0)
assumeAlso(n>=0)
```

```
assumeAlso(a0>=0)
diff(S,U)
diff(S,V)
diff(S,n)
```

Integrálás

```
syms x n
f = x^n
df = diff(f,x)
assume(n>0)
int(df,x)
```

Határozott integrálás

```
syms V
p = 0.4/(V-4)
int(p,V)
W = int(p,V,[5 8])
double(W)
fplot(p,[5 8])
```

Taylor-polinom kiszámítása

```
syms x
f = x^3 - x^2 + x -1;
t0 = taylor(f,x,'ExpansionPoint',0,'Order',1)
t1 = taylor(f,x,'ExpansionPoint',0,'Order',2)
t2 = taylor(f,x,'ExpansionPoint',0,'Order',3)
t3 = taylor(f,x,'ExpansionPoint',0,'Order',4)
fplot([f t0 t1 t2 t3],[-3 3])
syms x
f = exp(x);
t1 = taylor(f,x,'ExpansionPoint',0,'Order',2)
R = f-t1
fplot([f t1 R],[0 2])
```

2D Gauss függvény szintvonalas és 3D ábrái

```
syms x y
f = (1/2/pi)*exp(-(x^2/2 + y^2/2));
fcontour(f)
axis equal
fsurf(f)
```

Differenciálegyenletek megoldása

```
syms c(t) k t
assume(t>0)
v0 = diff(c,t)==-k
v1 = diff(c,t)==-k*c
v2 = diff(c,t)==-k*c^2
kf = c(0) == 1
c0 = dsolve(v0,kf)
c1 = dsolve(v1,kf)
c2 = dsolve(v2,kf)
c0 = subs(c0,k,0.8)
c1 = subs(c1,k,0.8)
c2 = subs(c2,k,0.8)
assumeAlso([c0 c1 c2] > 0)
fplot([c0 c1 c2])
```

Határérték meghatározása

```
syms x
f=sin(x)/x
limit(f,x,-Inf)
limit(f,x,-Inf)
limit(f,x,0)
limit(tan(x),x,pi/2)
limit(tan(x),x,pi/2,"left")
limit(tan(x),x,pi/2,"right")
fplot(f,[-30 30])
```

Függvényelemzés

```
syms x
f = 2*x^2-x^4;
f1=diff(f,x)
f2=diff(f,x,2)
limit(f,x,-Inf)
limit(f,x,-Inf)
fplot([f f1 f2],[-2 2])
hold on
ylim([-5 5])
z0=solve(f,x)
plot(z0,0,"bo")
```

```
z1=solve(f1,x)
sign(subs(f1,x,z1(1)-eps))
sign(subs(f1,x,z1(1)+eps))
sign(subs(f1,x,z1(2)-eps))
sign(subs(f1,x,z1(2)+eps))
sign(subs(f1,x,z1(3)-eps))
sign(subs(f1,x,z1(3)+eps))
plot(z1,0,"ro")
z2=solve(f2,x)
sign(subs(f2,x,z2(1)-eps))
sign(subs(f2,x,z2(1)+eps))
sign(subs(f2,x,z2(2)-eps))
sign(subs(f2,x,z2(2)+eps))
plot(z2,0,"go")
```