Numerikus matematika

II. évf. info-vegy

Tóth Gergely óráinak I. része

Numerikus analízis vegyészeknek

Bevezetés

Miért? Valkó...

Célja: - szimbólikus programok ne feketedobozként
- saját programok - feladatok (rutingyűjtemények)

Numerikus analízis ≈ azokkal a numerikus módszerekkel foglalkozik, amelyeket tud-műsz. feladatok számítógépes megoldásakor alkalmazunk

Algoritmusok fejlesztése, vizsgálata adott esetekre

Ma: num. anal választ ad sokszor, ha nincs analitikus megold (kinetika)

Hibák: - véges számábrázolás (lebegő pontos, 8-16 értékes jegy, egész O.k., kerekítési hiba, igazi értékes jegyek száma (-, /)
- levágási hiba: pl. sorok fv.-ek számolásánál
- bevitt adatok hibája:
- numerikus módszer hibája

Stabilitás: csökkenti v. növeli (a korábbi) hibát

robusztus: jó-e más inputtal

Num. anal.
2000-2001/II
Könyvek

Források:

Vallkó Péter-Vajda Sándor:
Műszaki tudományos feladatok megoldása számítógéppel
Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1987

W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery
Numerical Recipes in Fortran II. ed.
Cambridge University Press, 1992

C.F. Gerald, P.O. Wheatley
Applied Numerical Analysis VI. ed.
Addison-Wesley, 1999

Pusztai László, Kalincsák Ferenc órai anyagai

Horvai, Borosy, Szepesváry (szerkesztők):
Sokváltozós adatelemzés (kemometria)
Nemzeti Tankönyvkiadó Rt.
Budapest, 2001

Matematikai alapok: Lineáris Egyenletrendszer

Mátrix: hely és érték

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{1m} \\ a_{n1} & a_{nm} \end{bmatrix}$$

oszlopvektor, sorvektor

műveletek:

$C = A + B$ $\quad c_{ik} = a_{ik} + b_{ik}$

$cA = [c \cdot a_{ik}]$

$C = A \cdot B$ $\quad c_{ij} = \sum_{k=1}^{m} a_{ik} b_{kj}$ $\quad C_{LN} = A_{LM} \cdot B_{MN}$

nxn mátrix determinánsa:

$$|A| = \sum_{p} (-1)^{t} \cancel{a_{1k_1} \dots a_{nk_n}} \; a_{1k_1} \dots a_{nk_n}$$

n! darab

minden sorból egy elem, de más-más oszlopból

+1 oszlopindexek permutációja páros

−1 ha páratlan

tulajdonságai:

- egyik sor összes eleme 0 → det A = 0
- −"− c·~~sor a másik~~ vel szorozva: c·det A ~~= det c·A~~
- sorcsere → előjel váltása
- egyik sor a másik konstansszorosa det|A| = 0
- −"− +a másik egy konstansszorosa det A = det A
- sorra ~~oszlop~~ igaz oszlopra is
- $|AB| = |A||B|$

det|A| = 0 „szinguláris"

Spec. mátrixok:

$E \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad A^T \quad [a_{ik}] = [a_{ki}^T] \qquad$ szimmetrikus $A^T = A$

inverz $A^{-1} A = E$ $\qquad a_{ik}^{-1} = \dfrac{\det |A_{ki}|}{\det |A|}$ ← előjeles aldetermináns

A_{ki} = eredeti mátrix k. sor és i. oszlop nélkül

Kerülő: lin. tér: $a_1 \dots a_m$ vektorrendszer koordinátáit mátrixba

n-dim tér, vektorok lin. függetlensége $s_1 a_1 + \dots s_n a_n = 0$

lin. független, ha ez igaz csak $\forall \underline{s} = 0$ ra teljesül

lin. tér dimenziója = mátrix rangja

redukálté, vagy saját maga det A ≠ 0

szinguláris ⟷ rang<n ⟷ lin. függő

nemszinguláris = rang = n = lin. független

Num: anal.
2000-2001/II
Lin. egy. 2.

Lin. egyenletrendszer általános alak:

$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots = b_1$ $\quad A \in R^{n \times n}$ $\underline{x} \in R^n$ $\underline{b} \in R^n$

$a_{n1}x_1 \qquad a_{nn}x_n = b_n$

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

inhomogén: legalább egy $b_i \neq 0$

egyértelmű megoldás, ha $\det A \neq 0$.

$\Downarrow$

lineáris inhomogén egyenletrendszer

Ha $n \neq m$: $n > m$ túlhatározott → min, max keresés, illesztés
$n < m$ alulhatározott → ? inkább ne használjuk!

$\boxed{\text{Direkt módszerek}}$:

Gauss elimináció: el. mátrix, eredmény vektor: hibővített mátrix formalizmus

$(\equiv|\vdots) \xrightarrow{\text{elimináció}} (\equiv|\vdots) \xrightarrow{\text{visszahelyettesítés}} (\ddots|\vdots)$ felsőháromszög alak

i-dik lépésben hozzáadjuk a j-dik sorhoz az i-dik sor $\left(-\frac{a_{ji}}{a_{ii}}\right)$ szeresét

elimináció: $a_{kl}^{(i)} = a_{kl}^{(i-1)} - \frac{a_{ki}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}} a_{il}^{(i-1)}$ $\quad i = 1, 2, \dots n-1$, $k > i$, $l \geq i$

visszahelyettesítés:
i-dik lépésben a j-dik sorhoz hozzáadjuk az $n-i+1$ sor

$-\frac{a_{j,n-i+1}}{a_{n-i+1,n-i+1}}$ szeresét $\quad (i = 1 \dots n-1,\ j < n-i+1)$

utána $x_i = \frac{b_i}{a_{ii}}$

osztás+szorzás: $n^3/3 + n^2 - n/3$

num. anal.
2000-2001/II.
Lin. egy. 3.

Főelem kiválasztása:

ha $a_{11}=0$, vagy $|a_{ii}|<\varepsilon$?

részleges: sorcsere, hogy új $|a_{ii}|>\varepsilon$ legyen

teljes: oszlopcsere is, úgy hogy maximális legyen az új $|a_{ii}|$

permutációs mátrix sorcserére

$$P=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}$$

Jordan-elimináció:

$$(\equiv|\vdots)\longrightarrow\left(\begin{smallmatrix}1&&0\\&\ddots&\\0&&1\end{smallmatrix}\middle|\vdots\right)$$

i-dik lépésben: – i-dik sort elosztjuk $a_{ii}^{(i-1)}$-gyel

– a j-dik sorból kivonjuk az új i-dik sor $a_{ji}^{(i-1)}$-szeresét

$(i=1,2,\dots,n-1,\quad 1\le j\le n,\ i\ne j)$

Összefoglalva:

$$a_{kl}^{(i)}=a_{kl}^{(i-1)}-\frac{a_{ki}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}}\,a_{il}^{(i-1)}$$

$i=1,2,n,\ 1\le k\le n,\ k\ne i,\ l\ge i$

igény: $n^3/2+n^2-7n/2+2$

LU felbontás:

L = lower triangle V = upper triangle

$$(\equiv)\longrightarrow\left(\begin{smallmatrix}1&&0\\&\ddots&\\ &&1\end{smallmatrix}\right)\left(\begin{smallmatrix}&&\\&\ddots&\\0&&\end{smallmatrix}\right)$$

valamelyiknél (L vagy U) csak 1-es

$Ax=b$

$PAx=Pb$

$PA=LU$

$LUx=Pb=b'$

$Ux=d$

1.) $Ld=b'$

2.) $Ux=d$

mivel L és U háromszögmátrix csak visszahelyettesítés kell

előny: LU felbontás nem függ $\underline{b}$-től!

Crout felbontás (LU-hoz egy algoritmus)

Num. anal. 2000/2001/II.
Lin. egy. 4.

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & & & 0 \\ l_{41} & & & l_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & & & \\ a_{31} & & & \\ a_{41} & & & a_{44} \end{bmatrix}$$

- $l_{11} = a_{11}$ $\quad l_{21} = a_{21}$ $\quad l_{31} = a_{31}$ $\quad l_{41} = a_{41}$
- $l_{11}u_{12} = a_{12}$ $\quad l_{11}u_{13} = a_{13}$ $\quad l_{11}u_{14} = a_{14}$ $\Rightarrow$ $u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}} \dots$
- $l_{21}u_{12} + l_{22} = a_{22}$ $\quad l_{31}u_{12} + l_{32} = a_{32} \dots$

$\vdots$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} \qquad j \le i \qquad i = 1, 2, \dots n$$

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}}{l_{ii}} \qquad i \le j \qquad j = 2, 3, \dots n$$

kompakt tárolás: $\begin{bmatrix} l_{11} & u_{12} & u \\ & L & \end{bmatrix}$ $\qquad$ igény: $\frac{n^3}{3} + (n^2)$

b-ként

Cholesky felbontás:

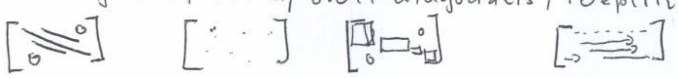
szimmetrikus $a_{ij} = a_{ji}$ és pozitív definit ($\underline{x} A \underline{x} > 0$ minden $\underline{x}$-re)

$A = L \cdot L^T$ $\qquad$ gyorsabb módszer

ez is alsóháromszög

Speciális mátrixokra speciális lehetőségek

Tridiagonális, ritka, blokk-diagonális, Toeplitz $(-2, -3)$



ITERATÍV FINOMÍTÁS NUMERIKUS HIBÁK ELTÁVOLÍTÁSÁRA

$Ax = b \Rightarrow A\bar{x} = \bar{b}$ $\qquad r = b - \bar{b}$ $\qquad e = x - \bar{x}$ $\qquad$ ‾ jelöli a közelítésként kapott megoldást

maradék $\qquad$ hiba

megoldani $\quad Ae = r$

$x_{új} = \bar{x} + \bar{e}$

felülvonásos vektorok a megoldásként kapottakat jelentik, amik nem tökéletesek a numerikus hibák miatt

Num anal. 2000-2001/II Lin. egy. 5.

Determináns kiszámolása:

$\sum (-1)^I a_{1i_1} \cdots\cdots a_{ni_n}$ rengeteg szorzás

U-ra: $\nabla = \prod_{i=1}^{n} a_{ii} = \det(U)$

(· Permutáció páros, vagy páratlan)

Cramer szabály: $x_i = \dfrac{\det A_i}{\det A}$ ← i-dik oszlop b-re cserélve (lehetetlen)

Invert mátrix meghatározása:

$A \cdot A^{-1} = E \qquad A \cdot (\,) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

LU-val oszloponként: $\frac{4}{3} n^3$ összesen

$b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \; b_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \end{bmatrix} \ldots b_n = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$

óra vége 200 2(?) 200

Iteratív megoldások

$a_{ii} \neq 0$ alakra hozni:

Jacobi-iteráció

$Ax = (L+D+U)x = b$

$Dx = -(L+U)x + b$

$x^{n+1} = -D^{-1}(L+U)x^n + D^{-1}b$ ⊁ direkt módszer nem.lin. egyenleteknél.

konvergens, ha $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} a_{ij}$ soronként

(sor) diagonálisan domináns

$x_k^{(i+1)} = -\dfrac{1}{a_{kk}} \left(a_{k1}x_1^{(i)} + \quad + a_{k,k-1}x_{k-1}^{(i)} + a_{k,k+1}x_{k+1}^{(i)} + \ldots + a_{kn}x_n^{(i)} - b_k\right)$ ← i-dik-ből

$k = 1 \ldots n \quad i = 0, 1 \ldots$

leállás: $\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| < \varepsilon$

Seidel-iteráció

$Ax = (D+L+U)x = b$

$(D+L)x = -Ux + b$

$x = -(D+L)^{-1}U\underline{x} + (D+L)^{-1}\underline{b}$

(i+1)-dik alapján, amire van már (i+1)-dik közelítés

$x_k^{(i+1)} = -\dfrac{1}{a_{kk}} \left(a_{k1}x_1^{(i+1)} + \quad + a_{k,k-1}x_{k-1}^{(i+1)} + a_{k,k+1}x_{k+1}^{(i)} + \ldots \uparrow \right)$

2002/2003. II. félév
Num. anal.
Lin. egy. 6.

Relaxációs módszer: (kézi módszer, pl. ha nincs gép)

átrendezés:

$$\begin{matrix} \ldots\ldots = b_1 \\ \vdots \\ \ldots = b_n \end{matrix} \xrightarrow[-b_n]{-b_1 \;\vdots} \begin{matrix} \ldots -b_1 = 0 \\ \vdots \\ \ldots -b_n = 0 \end{matrix} \xrightarrow[/-\max a_{n j}]{/-\max a_{1j}\;\vdots} \xrightarrow[\text{kerüljenek}]{\text{sorcserék, hogy a -1-ek lehetőleg a diag.-ba}} \begin{matrix} -1x_1 & & =0 \\ & \ddots & \\ & & -1x_n \ldots = 0 \end{matrix}$$

- kiszámolni a kezdeti $\underline{x}$-vektorral

$$-1x_1 \ldots\ldots = R_1$$

$$-x_n \ldots = R_n$$

maradék vektort kapunk $\underline{R}$, mert $\underline{x}$ csak közelítő

ahol R_i a legnagyobb, ott x_i-et átírni úgy, hogy $R_i = 0$ legyen
új x_i-t a többi sorban is átírni,
* kikeresni az új legnagyobb R_j-t és annak az x_j-jét átírni, hogy $R_j=0$ legyen, x_j-t a többi sorban is átírni. Ezt *-tól ismételni $\underline{R}=0$-ig.

Túlrelaxálás:

gyakorlati tapasztalat, hogy gyorsabb, ha ~~R~~ x_i-t nem úgy változtatjuk, hogy $R_i=0$ legyen, hanem R_i például $-R_i/3$ legyen!

valami szám

ugyanez áll pl. Seidel iterációra is

$\frac{1}{a_{ii}}$ helyett $\frac{w}{a_{ii}}$, ahol

~~$w \approx 1.2$~~
$2 > w > 1$

Num anal
2000-2001/II.
Lin. egy 07

~~Relaxációs módszer~~

$$\begin{matrix} \dots = b_1 \\ \dots = b_2 \\ \dots = b_3 \\ \vdots \end{matrix} \rightarrow \begin{matrix} \dots - b_1 = 0 \\ \dots - b_2 = 0 \\ \dots - b_3 = 0 \end{matrix} \quad \begin{matrix} / - \max a_{1j} \\ / - \max a_{2j} \\ / - \max a_{3j} \end{matrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{matrix} \dots + R_1 = 0 \\ \dots + R_2 = 0 \\ \dots + R_3 = 0 \end{matrix}$$

kezdeti $\underline{x}$-szel kiszámolni,
* ahol a legnagyobb az eltérés, ott x_i-t átírni (ahol egy a koef), majd újra számolni és *

túlrelaxálás: szorzóval (1-2)

NORMA, KONDICIONÁLTSÁG:

számoknál $|R|$, ok. itt más kell:

Norma tulajdonságai:

$\|A\| \geq 0$

$\|kA\| = k\|A\|$

$\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|$

$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$

Vektor:

$\cancel{\|x\|_p = (\sum x}$

$$\begin{cases} \|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| & \text{hosszak összege} \\ \|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} & \text{Euklideszi} \\ \|x\|_\infty = \max |x_i| \end{cases}$$

Mátrix normák:

$\|A\|_1 = \max\limits_{1 \leq j \leq n} \sum\limits_{i=1}^{n} |a_{ij}|$ max. oszlopösszeg

$\|A\|_\infty = \max\limits_{1 \leq i \leq n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$ max. sorösszeg

$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}}$ of $A \cdot A^T$ spektrális norma $\|A\|_2 \leq \|A\|_1, \|A\|_\infty$

$\|A\|_F = \left(\sum \sum a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}}$ Frobenius norma

Rosszul kondicionált:
↑
inputra rendkívül érzékeny

$$\begin{bmatrix} 1{,}01 & 0{,}99 \\ 0{,}99 & 1{,}01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.00 \\ 2.00 \end{bmatrix} \Rightarrow x = 1 \quad y = 1$$

$$\begin{bmatrix} 1{,}98 \\ 2{,}02 \end{bmatrix} \Rightarrow x = 2 \quad y = 0$$

levezethető:

$$\frac{\overset{x \text{ hibája}}{\|e\|}}{\|x\|} \leq \underbrace{\|A\| \|A^{-1}\|}_{\text{kondíciószám}} \frac{\|r\|}{\|b\|}$$

$\|r\|$: b-től való eltérés

kondíciószám (nagy ha rosszul kondicionált!)

Tehát a megoldás hibája becsülhető a b-től való eltérés és a kondíciószám alapján.

Elmaradt: SVD* → fv. min-max, modellezés, legkisebb négyzetek.

konj. grad. → —"—

QR → ?

Singuláris érték-felbontás
*Singular value decomposition

$\boxed{\text{Véletlenszámok}}$

igazából pszeudo véletlenszámok

Neumann János (1951)

négyjegyű szám

Heurisztikus képletek

<u>Kongruencia generátorok:</u> egyenletes eloszlás

$x_i = [a x_{i-1} + c]_{\mathrm{mod}\, m}$ $\quad x_i > 0 \quad x_i \in R$

$0 \le \frac{x_i}{m} < 1$ $\quad c = 0$ multiplikatív kong. gen.

kívánt tulajdonságok:
- egyenletes $[0;1]$
- hosszú visszatérési idő ($x_i \in N$)
- x_i és x_{i+1} között nincs „korreláció"

} tesztek

jó generátor: $x \in N$, $c = 0$, $a = 16807$, $m = 2^{31} - 1 = 2147483647$
- nem jó tetszőleges a, c, m
- gépi rutinok
- módosítások (lásd Num. Rec.)
- kezdeti érték

<u>Más eloszlások:</u>

$[x; x+dx]$ közé esik $p(x)\,dx = \begin{cases} dx & 0 < x < 1 \\ 0 \end{cases}$ $\quad \int_{-\infty}^{\infty} p(x)\,dx = 1$

ismert $y(x)$ $\quad p(y)\,dy = p(x)\,dx \Rightarrow p(y) = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right|$

<u>1. példa: (exponenciális eloszlás)</u> $\quad y(x) = -\ln x$

$p(y)\,dy = p(x) \left| \frac{dx}{dy} \right| \cdot dy = e^{-y}\,dy$

inverz fv-t kell ismerni

1.) $0 \le x < 1$ generálása x-ek

2.) $y = -\ln x$, így y-ok e^{-y} szerint lesznek

$x = e^{\ln x}$

2 h

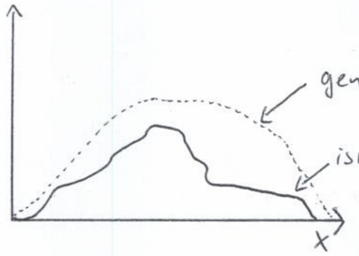
Num. anal.
2000-2001/II
Véletlenszámok II.

2. példa: standard normális eloszlás (Box-Müller 1958)

1.) x_1 és x_2 generálása $0 \le x_1 < 1$, $0 \le x_2 < 1$ egyenletesen

$$2.)\quad \left.\begin{aligned} y_1 &= \sqrt{-2\ln x_1}\cdot\cos(2\pi x_2) \\ y_2 &= \sqrt{-2\ln x_2}\cdot\sin(2\pi x_1) \end{aligned}\right\}\ \text{2 szám}$$

Elvetéses módszer: Neumann János 1951



$f(x) \geq p(x)$ minden x-re

1.) generálni x-et $f(x)$ eloszlásnak megfelelően

2.) generálni ξ-t egyenletesen $0 \le \xi < 1$

3.) ha $\dfrac{p(x)}{f(x)} \geq \xi$ elfogadjuk x-et,

ha $\dfrac{p(x)}{f(x)} < \xi$ elvetjük x-et

Egyéb példák: pl. gömb felület...

4. vége 2004

3. vége 2006.
numerikus
dif. és int.

$\boxed{\text{Sorbarendezés}}$

feladatok: - adott vektor elemeinek sorbarendezése
- több vektor elemeinek egy adott vektor elemei szerinti sorbarendezése
- index vagy rang vektor ~~eleme~~ meghatározása
~~intervallum keresése~~

Műveleti igény $\lesssim N^2$, de kis N-nél bármi jó.

<u>Közvetlen beszúrás módszere:</u> $\approx N^2$

külső ciklus: a_j $j = 2, 3, \dots N$

belső ciklus: a_i $i = j-1, j-2, \dots 1$ ha $a_j \le a_i$ $a_{i+1} = a_i$,

ha $a_j > a_i$: $a_{i+1} = a_j$, next j

vagy $i = 0$ ~~$i=0$-nál $a_{i+1} = a_j$~~

cserével buborék > sorbarendezés külön lapon

<u>Shell módszere:</u> csoportok képzése 16 számnál pl:

$a_j - a_i = 8$ $(a_1, a_9); (a_2, a_{10}), (a_3, a_{11}), (a_4 a_{12}), \dots (a_8 a_{16})$

$a_j - a_i = 4$ $(a_1, a_5, a_9, a_{13}); (a_2 a_6, a_{10}, a_{14}) \dots, (a_4, a_8, a_{12} a_{16})$

$a_j - a_i = 2$ $(a_1, a_3, a_5 \dots a_{15}); (a_2, a_4, \dots a_{16})$

$a_j - a_i = 1$ $(a_1 \dots a_{16})$

csoportokon belül ~~sorbarendezés~~ előrendezés közvetlen beszúrással

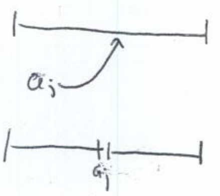
lépték: 2^{k-1} $k=1,4..$ de jobb a $(3^k-1)/2$ $(\dots 40, 13, 4, 1)$

$N^{1,25} \le \quad \le N^{1,5}$

<u>Gyorsrendezés:</u> tetszőleges a_j kiválasztása

$\le N^2 \leftarrow$ ha már rendezett lassú

de átlagban ~~jobb~~ a legjobb!



nem azonos sebességgel

$i \ne j, 1, 2 \dots \rightarrow$ $k \ne j, N, N-1, \dots$

ha $a_i \ge a_j$ és $a_k \le a_j$

a_k és a_i cseréje

ha $i = k$, a_j-t oda tenni

ezt ismételni az új rövidebb szakaszokra is

kis ...

26

Num. anal
2005-2006/II.
Sorbarendezés 1/b.

Rendezés cserével:

külső ciklus a_i: $i = 1, 2, 3 \ldots N-1$

belső ciklus a_j $j = i+1, i+2, \ldots N$

ha $a_i > a_j$ a_i és a_j helycsere

Buborék módszer

külső ciklus a_i $i = 2, 3, \ldots N$

belső ciklus a_j $j = N, N-1, N-2 \ldots i$

ha $a_{j-1} > a_j$

akkor a_{j-1} és a_j helycsere

27

Num anal
2000-2001/II
Sorbarendezés 2.

Index és rangvektorok:

eredeti	index	rang	rendezett
15	2	4	2
2	3	1	3
3	4	2	9
9	1	3	15

– több vektornál:

- előző algoritmusoknál a sorbarendezővel párhuzamosan rendezni
- index vektor létrehozása; $\boxed{1,2,3,4,\ldots}$ átrendezése párhuzamosan
- rangvektor kiszámolása

Rangvektor kiszámolása Lloyd módszerével:

$i = 1, N-1$
$j = i+1, N$
ha $a_i \le a_j$ $r_j = r_j + 1$
* ha $a_i > a_j$ $r_i = r_i + 1$

Stona 2005.[2]
4. óra vége 2001.

* nem. lin. egyenletekben

Bináris keresés: $a_1 \le a_2 < a_3 \ldots < a_N$

$b = a_i$ $i = ?$

$a_i \le b \le a_{i+1}$ $i = ?$

(≈ lásd később a nemlineáris egyenlet megoldásánál)

intervallum felezés:

$j \quad k \quad i$

$$k = \mathrm{int}\left(\frac{i_f + j_a}{2}\right)$$

ha $a_k < b$, akkor $k \to j_a$
$a_k > b$ $k \to i_a$

„húr"-módszer

$$k = \mathrm{int}\left(\frac{j_f \cdot a_j - i_a \cdot a_j}{a_i - a_j}\right)$$

ha $a_k < b$ $k \to j$
$a_k > b$ $k \to i$

Nemlineáris egyenlet gyökei

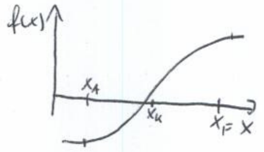
Num. anal.
2000-2001/II
Nemlineáris egyenlet gyökei 1.

$f(x)=0 \quad x=? \qquad g(x)=y \to f(x)=g(x)-y \quad y_0 \to x_0?$

lineáris egyenlet megoldása: egyértelmű direkt módszerrel
itt iteratív módszerek:
leállás: $|x_i - x_{i-1}|<\varepsilon$, $|f(x_i)-f(x_{i-1})|<\varepsilon$, $i > N_{maxit}$

Intervallum felezése: jelváltó hely: $f(x_A)\cdot f(x_F)<0$

2 kezdő, biztos jelváltás



$$x_k = \frac{x_A + x_F}{2}$$

$k=A$, ha $f(x_A)\cdot f(x_k)>0$
$k=F$, ha $f(x_F)\cdot f(x_k)>0$

$$n=\log_2 \frac{[x_A,x_F]}{\varepsilon}$$

Húrmódszer:
2 kezdő, biztos jelváltás

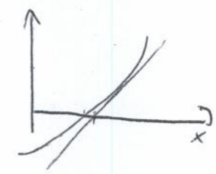
$$x_k = \frac{x_A \cdot f(x_F) - x_F \cdot f(x_A)}{f(x_F)-f(x_A)}$$

$k=A$ "
$k=F$ "

Szelő módszer:
2 kezdő, nem biztos

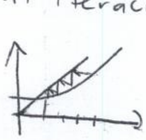
$$x_{k+1} = \frac{x_{k-1} f(x_k) - x_k \cdot f(x_{k-1})}{f(x_k)-f(x_{k-1})}$$

Newton módszere:
$f(x)$, $f'(x)$, 1 kezdő
nem biztos



$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

Fokozatos közelítés, direkt iteráció:
$x=g(x)$, 1 kezdő
nem biztos



$f(x)=0 \Rightarrow g(x)=x$

$$x_{k+1} = g(x_k)$$

Wegstein-módszer

$$x_{k+1}=(1-c)x_k + c\cdot g(x_k)$$

$$c = \frac{1}{1-\frac{g(x_k)-g(x_{k-1})}{\dots}}$$

Num. anal.
2000-2001/II
Nemlineáris
egyenlet gyökei 2.

<u>konvergencia:</u>

$e = \cancel{hiba}\ x_i - x_{egzakt}$

$$|e_{k+1}| \approx c \cdot |e_k|^p \quad k \to n$$

	p
Newton	2
Intfel:	1
Fokozatos:	1
Szelő	1,62

Müller: 1,84
Ridders: 2,0
gyorsított fokozatos ≈ 2,0
Brent: 2,0

haleluja! „2 ~ kétszer annyi értékes jegy"

<u>bináris keresés</u> lásd korábbi papiron

Góra Viktor
2003

Num. anal.
2003-2004/II

Polinomok gyökei 1.

Polinomok gyökei

jók lennének az előző módszerek, ha nem ugyanazt találnánk meg többször!

Megoldás: gyöktényezős alak leosztása a már megtalált gyökkel:
= fokszám csökkentés

$$P_n(x) = a_0 + a_1 x^1 + a_2 x^2 + \ldots = \prod_{i=1}^{n} (x - x_i)$$

ha x_1-t csak közelítőleg ismerjük:

$$P_n(x) = (x - x_1)\, Q_{n-1}(x) + R$$ ← maradéktag

Newton módszer + fokszámcsökkentés

n-szer (egy gyök iteratív meghatározása; fokszám csökkentése)

$$\left(x^{(i+1)} = x^{(i)} - \frac{f(x^{(i)})}{f'(x^{(i)})} \right)$$

vagyis kell $P_n(x)$ és $P_n'(x)$

szintetikus osztás

$$P_n(x) = Q_{n-1}(x)\,(x - x_1) + R \xrightarrow{x \to x_1} P_n(x_1) = R$$

$$P_n'(x) = (x - x_1)\cdot Q_{n-1}'(x) + 1 \cdot Q_{n-1}(x) \xrightarrow{x \to x_1} P_n'(x_1) = Q_{n-1}(x_1)$$

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i = (x - x_1) \sum_{i=0}^{n-1} b_i x^i + R = (x - x_1)\cdot Q_{n-1}(x) + R$$

x^k-s tagok kigyűjtése után:

$$\left.\begin{aligned}
b_{n-1} &= a_n \\
b_{n-2} &= a_{n-1} + x_1 b_{n-1} \\
b_{n-3} &= a_{n-2} + x_1 b_{n-2} \\
&\vdots \\
b_0 &= a_1 + x_1 b_1 \\
R &= a_0 + x_1 b_0
\end{aligned}\right\}$$

vagyis x_1 meghatározása után megvannak Q_{n-1} e.h.-i

(Horner-elrendezésnek hívják)

Num. anal.
2003-2004/II.
polinomok
gyökei 2.

Laguarre + fokszámcsökkentés

Laguarre módszere:

Tf: $P_n(x) = \prod_{i=1}^{n} (x - x_i)$

$$A \equiv \frac{d \ln |P_n(x)|}{dx} = \frac{P_n'}{P_n} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(x-x_i)}$$

$$B \equiv -\frac{d^2 \ln |P_n(x)|}{dx^2} = \left(\frac{P_n'}{P_n}\right)^2 - \frac{P_n''}{P_n} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(x-x_i)^2}$$

Tf: $x^{(0)}$ kezdeti érték adott távolságra van x_1-től, a többitől pedig egyformán messze:

$a = x^{(0)} - x_1 \qquad b = x^{(0)} - x_i$, ahol $i \neq 1$

$A = \frac{1}{a} + \frac{n-1}{b} \qquad B = \frac{1}{a^2} + \frac{n-1}{b^2}$

$$a = \frac{n}{A \pm \underbrace{\mathrm{sig}[A]}_{\text{előjel fv.}} \sqrt{(n-1)(nB-A^2)}}$$

$$x_k^{(l+1)} = x_k^{(l)} - a$$

x_k iteratív meghatározása
fokszámcsökkentés

Sajátérték-egyenletre való visszavezetés

„kísérő"-mátrix
~~[illegible]~~
$n \times n$

$$A = \begin{bmatrix} -\frac{a_0}{a_n} & -\frac{a_1}{a_n} & \cdots & -\frac{a_{n-1}}{a_n} \\ 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & & \ddots \; 1 & 0 \end{bmatrix}$$

előjel, mindött - lassú, de biztos módszer

λ = sajátértékek = gyökök

Polirozás:

Newton körökkel újra finomítjuk a már meghapott gyököket

Figyelem:

- többszörös gyökök (jelváltás figyelése)
- Newton lelassul: 
- komplex gyökök → kész rutinok (lásd Num. Rec.)

2005. tavasz vége
2006. tavasz

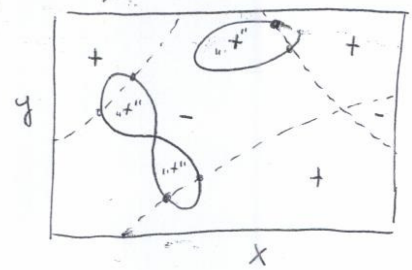
Nemlineáris egyenletrendszer gyökei

Num. anal.
2000-2001/II.
Nemlineáris egyenletrendszer gyökei 1

$\underline{f}(\underline{x})=0 \quad \underline{x}=?$ $\qquad x, f$ n-elemű

két egyenlet: $f(x,y)$, $g(x,y)$

kicsi az esély!
nincs gyökbefogás



Egyszerű: fokozatos közelítés

$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{g}(\underline{x}^{(k)})$ ha megr

$\underline{x}^{(k+1)} = (1-c)\underline{x}^{(k)} + \underline{c}\, \underline{g}(\underline{x}^{(k)})$ $\qquad 0<c<1$ csillapított
$\qquad 1<c$ gyorsított $(1-c) \geq 0$

Wegstein:

$\underline{c}$ $\qquad c_i = \dfrac{1}{1-\dfrac{g_i(\underline{x}^{k}) - g_i(\underline{x}^{k-1})}{x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)}}}$

Newton-Raphson:

$f(x) = f(x_0) + \dfrac{df}{dx}(x-x_0) \rightarrow x^{k+1} = x^k - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$

$\underline{f}(\underline{x}) = \underline{f}(\underline{x}_0) + \mathcal{J}(\underline{x})(\underline{x}-\underline{x}_0) \xrightarrow{\text{inv. mátrix}} \underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k - [\mathcal{J}(\underline{x}^k)]^{-1} \cdot \underline{f}(\underline{x}^{(k)})$

két féle megoldás:

2.) $\equiv 0$ $\quad$ ismert $\quad$ ismert $\quad$ meghat. lin. egyenletr.-ből $\qquad \mathcal{J}_{ij}(x) = \dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$ Jacobi-mátrix

1.) kiszámolása (N^3) mátrix inverzióval

Lépés sokszor túl nagy:

$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} - \lambda\, \underline{f}(\underline{x}^{k}) \cdot [\mathcal{J}(\underline{x}^k)]^{-1} \qquad 0<\lambda<1$

λ meghatározása úgy, hogy $[\underline{f}^2(x)]^2$ csökkenjen (line search, backtracking)

$\mathcal{J}$ analitikusan, vagy véges differenciákkal

Kvázi Newton módszerek

Num. anal,
2001/2002. II. félév
Nemlineáris egyenletrendsz. gyökei 2.

J helyett közelítő J-t használnak

Az iteratív lépésekben inkább J^{-1}-t változtatják közvetlenül

Broyden-módszer

$$\underline{x}^{(k+1)} = \underline{x}^{(k)} - \left[B^{(k+1)}\right]^{-1} \cdot f(\underline{x}^{(k)})$$

a k+1 index megszokás, először ezt iterálják, aztán az $x^{(k+1)}$-et

Feltevései: $$\underbrace{\underline{f}(\underline{x}^{(k)}) - f(\underline{x}^{(k-1)})}_{\Delta \underline{f}^{(k)}} = B^{(k+1)} \cdot (\underbrace{\underline{x}^{(k)} - \underline{x}^{(k-1)}}_{\Delta \underline{x}^{(k)}})$$

további feltevések.....

Iteráció:

$$\left[B^{(k+1)}\right]^{-1} = \left[B^{(k)}\right]^{-1} - \left(\left[B^{(k)}\right]^{-1} \cdot \Delta \underline{f}^{(k)} - \Delta \underline{x}^{(k)}\right) \cdot \left(\Delta \underline{x}^{(k)}\right)^T \left[B^{(k)}\right]^{-1} \Big/ \left(1 + \left[\Delta \underline{x}^{(k)}\right]^T \left[B^{(k)}\right]^{-1} \Delta \underline{f}^{(k)}\right)$$

kezdeti $\left[B^{(0)}\right]^{-1}$-et valahogy ki kell számolni

konvergencia < négyzetes

5. vége 2004.

Num. anal.
2000-2001/II
Szélsőérték 1.

$\boxed{\text{Egyváltozós szélsőérték feladatok}}$

$[x_A, x_F]$ bizonytalansági intervallum

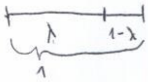
unimodális

Vágáson alapuló módszerek

$x_A < x_1 < x_2 < x_F$ ha $f(x_1) \le f(x_2) \to [x_A, x_2]$ -ben van a minimum

$f(x_1) \ge f(x_2) \to [x_1, x_F]$ -ben van a minimum

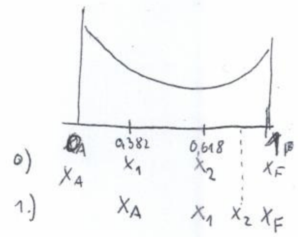
aranymetszés:



$1 : \lambda = \lambda : (1-\lambda)$ $\lambda = 0.61803\ldots$

$x_1 = \lambda \cdot x_A + (1-\lambda)\, x_F$

$x_2 = (1-\lambda)\, x_A + \lambda \cdot x_F$



kvadratikus interpoláció

$[x_1, f(x_1)]$; $[x_2, f(x_2)]$, $[x_3, f(x_3)]$ pontokra fektetett parabola minimuma:

$$x_4 = \frac{1}{2} \cdot \frac{(x_2^2 - x_3^2) f(x_1) + (x_3^2 - x_1^2) \cdot f(x_2) + (x_1^2 - x_2^2) f(x_3)}{(x_2 - x_3) \cdot f(x_1) + (x_3 - x_1) \cdot f(x_2) + (x_1 - x_2) \cdot f(x_3)}$$

sorbarendezett x_1, x_2, x_3-ból az ~~legtávolabbit dobjuk el~~
x_4-től legkevésbe szomszédosat
dobjuk el

Többváltozós szélsőérték keresése

Num. anal.
2000/2001/II.
Szélsőérték 2.

a.) csak $f(\underline{X})$ kell $\rightarrow$ közvetlen kereső eljárások

$\underline{X} \in R^N$

Nelder-Mead-féle szimplex módszer

$f(\underline{X})$ minimálása $N+1$ pontban $\underline{X}_1 \ldots \underline{X}_{N+1}$

$N=2 \rightarrow$ háromszög

$\rightarrow$ poliéder (szimplex)

$\min f(x) \rightarrow \underline{X}_{min}$

$\max f(x) \rightarrow \underline{X}_{max}$

súlypont: $\underline{\bar{X}} = \left[\sum_{i=1}^{n+1} \underline{X}_i - \underline{X}_{max} \right] / n$

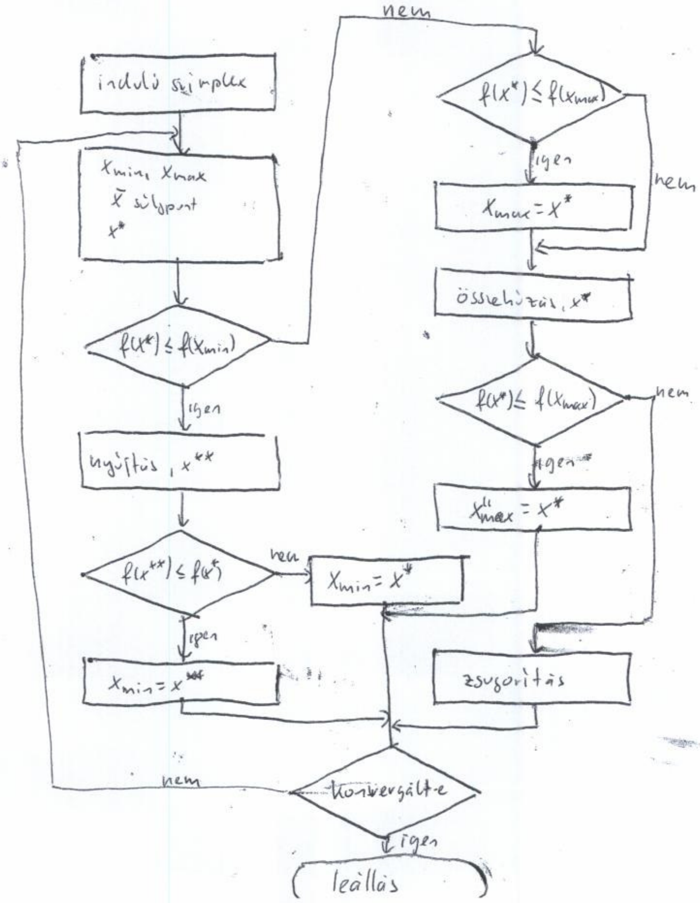
tükrözés a súlypontra: $x^* = 2\underline{\bar{X}} - \underline{X}_{max}$

nyújtás: $\underline{x}^{**} = \underline{x}^* + \underline{\bar{X}} - \underline{X}_{max}$

összehúzás: $\underline{x}^* = [\underline{X}_{max} + \underline{\bar{X}}]/2$

zsugorítás: $\underline{X}_i = [\underline{X}_i + \underline{X}_{min}]/2$ $\quad i = 1, 2 \ldots n+1$

folyamatábrája (lásd Valkó könyvben)



36

b) gradiens módszerek

$g_i = \partial f / \partial x_i$ is használja $f(\underline{x})$-en kívül

<u>legmeredekebb lejtő módszere</u>

$-\underline{g}$ felé csökken a legjobban

$\Downarrow$

$f[\underline{x}^k - \lambda \underline{g}(\underline{x}^{(k)})] \to$ minimalizálása λ szerint $\lambda \geq 0$

egyváltozós szélsőérték keresés = „iránymenti keresés"

$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k - \lambda_{min} \underline{g}(\underline{x}^k)$

mert

ortogonális a két egymásutáni gradiens!

<u>Konjugált gradiens módszer</u>

kétvektor: $\underline{h}_i$, $\underline{r}_i = \nabla f(\underline{x}_i)$ ellépés nem a gradiens irányában!

$\underline{h}_0, \underline{r}_0$ $\quad \underline{x}_{i+1} = \underline{x}_i + \lambda \underline{h}_i$ $\quad \lambda$ úgy, hogy $f(\underline{x}_{i+1}) = \min$

$=\underline{r}_0$

$\underline{r}_{i+1}$, $\underline{h}_{i+1} = \underline{r}_{i+1} + \gamma_i \underline{h}_i$ $\quad \gamma_i = \dfrac{\underline{r}_{i+1} \cdot \underline{r}_{i+1}}{\underline{r}_i \cdot \underline{r}_i}$ Fletcher–Reeves

tulajdonságok: $\underline{r}_i \cdot \underline{r}_j = 0$ $\quad \underline{r}_i \cdot \underline{h}_j = 0$ $\quad i \neq j$

$$\gamma_i = \frac{(\underline{r}_{i+1} - \underline{r}_i) \cdot \underline{r}_{i+1}}{\underline{r}_i \cdot \underline{r}_i}$$ Polak–Ribiere

általában más formában van leírva

2005/5 vége

Num. anal.
2000-2001/II
Szelsőérték 4.

C.) Newton-típusú eljárások

3.) $\underline{X}^{k+1} = \underline{X}^{k} - [H(\underline{X}^{(k)})]^{-1} g(\underline{X}^{(k)})$ ahol $H_{ij} = \partial^2 f / \partial x_i \partial x_j$ Hesse matrix

szimmetrikus és az eljárás végén pozitív definit

1) $f(\underline{X}) = f(\underline{X}_0') + (\underline{X}-\underline{X}_0') \cdot \nabla f(\underline{X}') + \frac{1}{2}(\underline{X}-\underline{X}') \cdot H \cdot (\underline{X}-\underline{X}')$

2) $\nabla f(\underline{X}) = 0 = \nabla f(X') + H \cdot (\underline{X}-\underline{X}')$

változó metrikájú (kvázi-Newton) eljárások

H^{-1} közelítése és felfrissítése B ~~segítségével~~ g alapján

Davidon-Fletcher-Powell

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \lambda^{(k)} B^{(k)} g(x^{(k)})$$

egydimenziós minimalizálás λ-ra

$$f[x^{(k)} - \lambda B^{(k)} g(x^{(k)})] \to \min_{\lambda \geq 0}$$

$$B^{(k+1)} = B^{(k)} + \frac{\Delta \underline{x}^{(k)} [\Delta \underline{x}^{k}]^T}{[\Delta x^{(k)}]^T \cdot \Delta g^{(k)}} - \frac{1}{[\Delta g^{(k)}]^T B^{(k)} \Delta g^{(k)}} (B^{(k)} \cdot \Delta g^{(k)})(B^{(k)} \Delta g^{(k)})^T$$

$$\Delta x^{(k)} = x^{(k)} - x^{(k+1)} \qquad \Delta g^{(k)} = g^{(k)} - g^{(k-1)}$$

2k Broyden

6. vége 2004

Paraméterbecslés

érés $\tilde{y}_i$, $\underline{x}_i$ $\quad y = f(\underline{x}, \underline{p})$ ismert forma

$y_i = f(\underline{x}_i, \underline{p}) + \varepsilon_i$

1.) függvénykapcsolat kiválasztása

2.) modell kiválasztása $\to$ $\tilde{x}_i$ $\to$ implicit

ε_i

$\mathrm{cov}(\varepsilon_i \varepsilon_j) = 0$?

becslési kritérium.

Leggyakrabban:

- x_i független és hibamentesen mérhető
- $M(\varepsilon_i) = 0$
- ε_i mérési hiba szórása ismert
- $\mathrm{cov}\{\varepsilon_i \varepsilon_j\} = 0$ ha $i \neq j$

Becslés kritériuma (LKN)

Legkisebb négyzetek $\quad Q(p) = \sum_{i=1}^{nm} (\tilde{y}_i - f(\underline{x}_i, \underline{p}))^2 \cdot w_i$ súly

ezek igazak

$\Downarrow$

$+ \; w_i = 1/\sigma_i^2$

$\Downarrow$

$\hat{\underline{p}}$ becslés torzítatlan minimális szórású

$\equiv$ ha $\underbrace{\varepsilon_i \approx \text{normál eloszlású} + \text{„maximum likelihood elv"}}_{\text{LKN a kritérium}}$

Adott $\hat{\underline{p}}$ mellett $\quad \underline{r}_i = \tilde{y}_i - f(\underline{x}_i, \underline{p})$

valószínűségi ~~statisztikai~~ változó $\leftarrow$ olyan alapon lehet vizsgálni!

reziduális hiba

....Zvége óra

Egyenesillesztés lineáris regresszióval

$y = ax + b \quad (x_i, \tilde{y}_i)$ n darab minta alapján

$D(\varepsilon_i) = \sigma_{\varepsilon_i} = \sigma_\varepsilon$

$$Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - a x_i - b)^2 \to \frac{\partial Q(a,b)}{\partial a} = 0 \quad \frac{\partial Q(a,b)}{\partial b} = 0$$

$$\hat{a} = \frac{n \sum x_i \tilde{y}_i - \sum x_i \sum \tilde{y}_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \qquad \hat{b} = \frac{\sum x_i^2 \sum \tilde{y}_i - \sum x_i \sum x_i \tilde{y}_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$s_r^2 = \frac{\sum r_i^2}{n-2} \qquad s_a^2 = s_r^2 \frac{n}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \qquad s_b = s_r^2 \frac{\sum x_i^2}{n\sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

VVM Anal
2000-2001/II
Paraméterbecslés

$\hat{a}, \hat{b}$ normális eloszlású → $n-2$ fokú Student eloszlás segítségével konfidencia intervallumok adhatóak!

Többváltozós lineáris regresszió

$$y = p_1 x_1 + p_2 x_2 + \ldots + p_n x_n \qquad n = \text{paraméterek száma}$$

$$(x_{i1}, x_{i2}, \ldots x_{in}) \qquad i = 1, 2, \ldots nm \qquad = \text{mérések száma}$$

$$\underline{\tilde{Y}} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{nm} \end{bmatrix} \qquad X = \begin{bmatrix} x_{11} & \ldots & x_{1n} \\ & & \\ x_{nm,1} & & x_{nm,n} \end{bmatrix} \qquad \underline{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \\ \varepsilon_{nm} \end{bmatrix} \qquad \underline{p} = \begin{bmatrix} p_1 \\ \\ p_{nx} \end{bmatrix}$$

$$\underline{\tilde{Y}} = X\underline{p} + \underline{\varepsilon} \qquad W \text{ diagonálisában } w_i \text{ súlyok}$$

$$Q(\underline{p}) = (\underline{\tilde{Y}} - X\underline{p})^T \cdot W \cdot (\underline{\tilde{Y}} - X\underline{p})$$

$$\downarrow \partial Q(\underline{p}) / \partial p_i = 0$$

normálegyenletek

$$\downarrow$$

?

▷ Túlhatározott lineáris egyenletrendszerek:

$$A\underline{x} = \underline{b} \qquad A \in R^{n \times m} \qquad b \in R^n$$

$$A^T \in R^{m \times n} \qquad x \in R^m$$

legyen $m < n$

$$A^T A \underline{x} = A^T \underline{b} \qquad A^T A \in R^{m \times m}$$

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

▷ $$\underline{\hat{p}} = (X^T W X)^{-1} \cdot X^T W \underline{\tilde{Y}}$$

$\hat{p}$ szórása, hibája → lásd Valkó könyv

—

40 Helyette: Szinguláris érték felbontás (SVD) ...

Num. Anal.
2000-2001/II.
Paraméterbecslés 3.

Többváltozós nemlineáris regresszió

$y = f(\underline{X}, \underline{p})$ $\qquad p \in R^{n}$

$\tilde{y}_i = f(\underline{X}_i, \underline{p}) + \varepsilon_i$ $\qquad \hat{Y} \in R^{km}$

$$\tilde{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_{km} \end{bmatrix} \quad F(\underline{p}) = \begin{bmatrix} f(\underline{X}_1, \underline{p}) \\ \vdots \\ f(X_{km}, \underline{p}) \end{bmatrix} \quad W = \begin{bmatrix} w_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & w_{km} \end{bmatrix}$$

$$Q(\underline{p}) = \left[\hat{\underline{Y}} - F(p)\right]^T W \left[\hat{\underline{Y}} - F(p)\right]$$

Gauss-Newton módszer

$$F(\underline{p}) \approx F(\underline{p}_0) + J(\underline{p}_0)[\underline{p} - p_0] \qquad J(p_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(\underline{X}_1, \underline{p})}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial f(\underline{X}_1, \underline{p})}{\partial p_n} \\ \vdots & \ddots & \\ \frac{\partial f(X_{km}, p)}{\partial p_1} & \cdots & \frac{\partial f(X_{km}, \underline{p})}{\partial p_n} \end{bmatrix}$$

*

$$Q(\underline{p}) = \left[\underbrace{\tilde{\underline{Y}}}_{\text{az előbbi } \hat{\underline{Y}}} - \underbrace{\underline{F}}_{\text{az előbbi } X} - \underbrace{\underline{J}}_{\text{az előbbi } \underline{p}}(p - p^{(0)})\right]^T W \left[\hat{\underline{Y}} - \underline{F} - \underline{J}(p - p^{(0)})\right]$$

$$\underline{p} - \underline{p}^{(0)} = (J^T W J)^{-1} \cdot J^T W (\tilde{\underline{Y}} - \underline{F})$$

* miatt közelítő, ezért:

$$\underline{p}^{(k+1)} = \underline{p}^{(k)} + \underbrace{[J^T W J]^{-1}}_{\text{baj, mert közel szinguláris}} \cdot J^T W (\hat{\underline{Y}} - \underline{F})$$

ahol a jobb oldalon minden a $\underline{p}^{(k)}$ helyen véve

Marquardt-eljárás:

$$[J^T W J + \lambda^{(k)} I]^{-1}$$ ← szingularitást csökkent!

$\lambda^{(k)} \geq 0$,

$\lambda^{(k)}$-ra receptek, minimumnál $\lambda \to 0$

(..) 2003

41